



قطب علمی فناوری نانو در محیط زیست

دانشگاه صنعتی اصفهان

گزارش مربوط به سال ۱۳۸۴

## بسمه تعالی

### گزارش فعالیت های قطب علمی فناوری نانو در محیط زیست

این گزارش بر اساس فعالیت هایی است که اعضای قطب علمی فناوری نانو در محیط زیست تدوین شده است. فعالیت های انجام شده با استفاده از بودجه سال ۱۳۸۴ قطب صورت گرفته است. البته طرح های تحقیقاتی در این گزارش بعضا از طریق منابع دیگری تامین اعتبار شده است.

#### ۱- مشخصات اعضای قطب علمی

ردیف	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	رشته تحصیلی	گرایش تخصصی	موسسه محل خدمت
1	هادی اکبرزاده	استاد	فیزیک	ماده چگال	دانشگاه صنعتی اصفهان
2	محمد شاهدی باغ خندان	استاد	مهندسی کشاورزی	مهندسی صنایع غذایی	دانشگاه صنعتی اصفهان
3	ابراهیم شیرانی	استاد	مهندسی مکانیک	میکرو و نانو سیالات	دانشگاه صنعتی اصفهان
4	محمود سلیمی	استاد	مهندسی مکانیک	نانو مواد	دانشگاه صنعتی اصفهان
5	سید غلامرضا اعتماد	استاد	مهندسی شیمی	پدیده های انتقال	دانشگاه صنعتی اصفهان
6	سید عبدالکریم حسینی	استاد	مهندسی نساجی	فیزیک الیاف	دانشگاه صنعتی اصفهان
7	حسین توانایی	دانشیار	مهندسی نساجی	علوم الیاف	دانشگاه صنعتی اصفهان

#### 2- طرح تحقیقاتی در دست اقدام

۱. مبدل های حرارتی با ذرات ریز برای افزایش راندمان و کاهش ابعاد
۲. تدوین یک برنامه کامپیوتری برای شبیه سازی جریان سیال همراه با انتقال حرارت در میکرو کانال ها
۳. تولید پارچه های چندلایه با استفاده از ریزلایه ها
۴. تولید انواع رشته های الیاف نانو جهت کاربردهای پزشکی
۵. طرح مطالعاتی کاربرد نانو تکنولوژی در صنایع نساجی
۶. بررسی آزمایشگاهی انتقال حرارت جابجایی اجباری نانو سیالات برای شرایط مرزی حرارتی مختلف و حالت جوش
۷. اندازه گیری خواص حرارتی روغنهای موتور در حضور نانو ذرات
۸. شبیه سازی کوانتومی سیم با ابعاد نانو ( nano wire ) از جنس MnAs
۹. شبیه سازی خواص اپتیکی سطح Co2MnSi با استفاده تکنیک های مبتنی بر نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان.

۱۰. کاربرد نانو تکنولوژی در صنایع نساجی
۱۱. تولید نانو الیاف هادی پلی اکریل یلونیتریل
۱۲. تولید و بهینه سازی الیاف نانو اکریلیک و پلی اتیلن اکسید
۱۳. تولید و بررسی خواص نانو لایه و الیاف جهت خشی سازی گاز های سمی

### 3- پروژه های تحصیلات تکمیلی و کارشناسی

موضوع پروژه	نام استاد راهنما	سطح پروژه	نام دانشجو	وضعیت پروژه
بررسی جریان خون در رگ ها	ابراهیم شیرانی و غلامرضا اعتماد	رساله دکتری	محمود رضا صادقی	در حال انجام
سوپر کاویتاسیون	ابراهیم شیرانی	رساله دکتری	محمد رضا عرب یار محمدی	در حال انجام
شبیه سازی جریان همراه با انتقال حرارت با روش شبکه بولتزمن	ابراهیم شیرانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	عباس صفایی	در حال اتمام
شبیه سازی حرکت و تغییر شکل قطره روی یک سطح	ابراهیم شیرانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	فرزان توکلی	در حال انجام
شبیه سازی جریان همراه با ذرات نانویی با روش شبکه بولتزمن	ابراهیم شیرانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	صالح نبی	در حال انجام
شبیه سازی جریان با سطح مشترک با روش شبکه بولتزمن	ابراهیم شیرانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	سید مهدی موسوی فرد	بزودی شروع می شود
شبیه سازی جریان در هندسه های با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن	ابراهیم شیرانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	جعفری فرسنگی سعید	پایان یافته
شبیه سازی جریان همراه با ذرات ریز قابل انعطاف با روش شبکه بولتزمن	ابراهیم شیرانی	پایان نامه کارشناسی ارشد	الناز السادات زهروی	بزودی شروع می شود
بررسی حرکت خون همراه با گلبول های قرمز	ابراهیم شیرانی	پروژه کارشناسی	حسام صالحی پور	در حال انجام
بررسی جریان میکرو همراه با نیروی الکترو استاتیکی	ابراهیم شیرانی	پروژه کارشناسی	بابک نوبری	در حال انجام
استفاده از نانو ذرات در بسته بندی محصولات غذایی برای ماندگاری بیشتر	محمد شاهدهی	رساله دکتری	امامی فر	در حال انجام

بررسی خواص انتقال حرارت و رطوبت از نانو لایه های PAN الکتروریسی شده	عبدالکریم حسینی و غلامرضا اعتماد	رساله دکتری	صدیقه برهانی	در حال انجام
طراحی و ساخت دستگاه تولید نخ از نانو الیاف الکتروریسی شده و بررسی خواص کششی آنها	عبدالکریم حسینی	پایان نامه کارشناسی ارشد	فرزاد دبیریان	پایان یافته
طراحی و ساخت دستگاه الکتروریسی تولید نانو الیاف PAN و بررسی پارامترهای موثر بر فرآیند تولید	مرشد و عبدالکریم حسینی	پایان نامه کارشناسی ارشد	روح الله جلیلی	پایان یافته
بررسی امکان تولید الیاف نانو از سدیم آلجینات به روش الکتروریسی شده	مرشد و عبدالکریم حسینی	پایان نامه کارشناسی ارشد	سمیه صفی	پایان یافته
تعیین شرایط بهینه تولید ریزلایه های کیتوسان و بررسی خواص فیزیکی آنها	عبدالکریم حسینی	پایان نامه کارشناسی ارشد	همایونی	در حال انجام
بررسی خواص مکانیکی پارچه های چندلایه پوشش داده شده با نانو الیاف	عبدالکریم حسینی	پروژه کارشناسی	راضیه هاشمی صنعتگر	پایان یافته
بررسی ارتباط بین شیدرنگی محلول پلیمری PAN و نانو الیاف الکتروریسی شده	عبدالکریم حسینی و عطائیان	پروژه کارشناسی	رعنا منشی	پایان یافته
بررسی Farcture نانو الیاف	عبدالکریم حسینی	پروژه کارشناسی	نسترن هاشمی	پایان یافته
بررسی خواص الاستیکی نانو لایه های PAN تثبیت شده	عبدالکریم حسینی	پروژه کارشناسی	اکرم عیوض خانی	پایان یافته
بررسی آزمایشگاهی انتقال حرارت جابجایی آزاد نانو سیالات غیر نیوتنی	سید غلامرضا اعتماد	رساله دکتری	محمود رضا خدنگی	در حال انجام
بررسی آزمایشگاهی انتقال حرارت جابجایی اجباری نانو سیالات غیر نیوتنی	سید غلامرضا اعتماد	رساله دکتری	محمدحجت	در حال انجام

مدلسازی هدایت حرارتی نانوسیالات	سیدغلامرضا اعتماد	رساله دکتری	محمد نصیری	در حال انجام
اندازه گیری هدایت حرارتی و گرمای ویژه نانوسیالات روغن موتور	سیدغلامرضا اعتماد	پایان نامه کارشناسی ارشد	سهراب خان محمدی	در حال انجام
اندازه گیری مشخصات حرارتی نانوسیالات غیرنیوتنی در مبدل‌های حرارتی دولوله ای	سیدغلامرضا اعتماد	پایان نامه کارشناسی ارشد	شهلا صفری	در حال انجام
اندازه گیری مشخصات حرارتی جوش نانوسیالات غیرنیوتنی	سیدغلامرضا اعتماد	پایان نامه کارشناسی ارشد	سعیده سلطانی	در حال انجام
اندازه گیری مشخصات الکترورنولوژیکی نانوسیالات غیرنیوتنی	سیدغلامرضا اعتماد	پایان نامه کارشناسی ارشد	هادی احمدی	در حال انجام
جداسازی فلزات سنگین توسط نانو ذرات مغناطیسی	سیدغلامرضا اعتماد	پایان نامه کارشناسی ارشد	هادی احمدی	در حال انجام
بررسی آزمایشگاهی انتقال حرارت جابجایی اجباری نانو سیالات در شرایط مرزی حرارتی دمای ثابت دیواره	سیدغلامرضا اعتماد	رساله دکتری	سعید زینالی هریس	خاتمه یافته
بررسی جذب سطحی آلاینده‌ی CO بر روی سطح (۱۱۱) فلزات واسطه‌ی Pt و Cu، با محاسبات میکروسکوپی کوانتومی	هادی اکبر زاده	رساله کارشناسی ارشد	حجت قلی زاده	در حال انجام
مطالعه اثر مشترک الیاز هوسلر CO <sub>2</sub> MnSi بازیرلایه GaAs	هادی اکبر زاده	رساله دکتری	ناهید قادری	در حال انجام
بررسی خواص ساختاری، مغناطیسی و الکترونی مرز مشترک Co <sub>2</sub> Cr <sub>0.5</sub> Fe <sub>0.5</sub> Al/GaAs در راستای [001]	هادی اکبر زاده	پایان نامه کارشناسی ارشد	ساره زارعی	پایان یافته است
بررسی سطح [001] آلیاز هوسلر Co <sub>2</sub> Cr <sub>0.5</sub> Fe <sub>0.5</sub> Al	هادی اکبر زاده	پایان نامه کارشناسی ارشد	زهره حفاری	در حال انجام
خواص ساختاری و الکترونی و مغناطیسی NixCr(1-x)	هادی اکبر زاده	پایان نامه کارشناسی ارشد	رستم گل‌سرخ تبار	پایان یافته است

در حال انجام	شهین براتی	پایان نامه کارشناسی ارشد	هادی اکبر زاده	شبیه سازی مرز مشترک CrSe/ZnSe
در حال انجام (مشترک )	امین بابازاده	پایان نامه کارشناسی ارشد	هادی اکبر زاده	محاسبه چگالی حالت نانو ذرات ZnS با استفاده از نظریه تابعی چگالی
در حال انجام	ابراهیم حضرتی	پایان نامه کارشناسی ارشد	هادی اکبر زاده	شبیه سازی مرز مشترک CrAs/GaAs
در حال انجام		رساله دکتری	حسین توانایی	بررسی تولید و خواص داربست نانو الیاف جهت کشت و تکثیر سلول های عصبی
پایان یافته است		پایان نامه کارشناسی ارشد	حسین توانایی	بررسی تولید نانو الیاف سدیم آلجنیات
پایان یافته است		پایان نامه کارشناسی ارشد	حسین توانایی	طراحی و ساخت دستگاه الکترو ریسی و تولید نانو الیاف
در حال اتمام		پایان نامه کارشناسی ارشد	حسین توانایی	تولید و بررسی خواص نانو الیاف حاوی نانو ذرات نقره
در حال انجام		پایان نامه کارشناسی ارشد	حسین توانایی	تولید نانو الیاف حاوی اکسید های فلزی
در حال انجام		پایان نامه کارشناسی ارشد	حسین توانایی	تولید نانو الیاف حاوی دارو و بررسی آزاد سازی
در حال انجام	اشرافی	رساله دکتری	محمود سلیمی	تولید توده مواد نانو ساختار به کمک روش تغییر شکل شدید مواد
در حال انجام	ابراهیم پور	پایان نامه کارشناسی ارشد	محمود سلیمی	ساخت ساخت نمونه های آزمایشگاهی ورقهای نانو ساختار به روش ARB
در حال انجام	محققان	پایان نامه کارشناسی ارشد	محمود سلیمی	ارائه مدل تغییر شکل پلاستیک مواد در مقیاس نانو

1. Shirani, E. and Jafari, S., "Application of Lattice Boltzmann Method in Simulation of Flow in Micro-Channels and in Micro and Nano Porous Media", Invited speaker, Proceedings of International Conf. on ,Micro and Nano-Technologies, ICMNT2006, Nov. 2006
2. Jalili R., Morshed M., Hosseini S. A., The effect of voltage on electrospinning of PAN nanofibers as uniaxially aligned fibers, The 8th Asian Textile Conference, Tehran, Iran, May 2005.
3. S.Borhani, S.A. Hosseini , M. Morshed, Evaluation of Optimal Performance of Activated Carbon Filter Media Coated with PAN Nanofibers ,International Fiber Conference,Korea , 2006
4. Jalili R., S. A. Hosseini, M. Morshed, Electrospinning of uniaxially aligned and molecularly oriented polyacrylonitril nanofibers, with separated collectors, Iranian Journal of Polymer science & Technology, Vol. 18, No 4, 248-241, 2005.
5. Jalili R., S. A. Hosseini, M. Morshed, The Effect of Operating Parameters on the Morphology of Electrospun PAN Nanofibers, Iranian Polymer Journal , Vol. 14, No. 12, 1080-1086, 2005.
6. R. Jalili, M. Morshed, S. A. Hosseini, Investigation of parameters affecting productivity of electrospun nanofibers, Iranian Journal of Polymer science & Technology, Vol. 19, No. 2, 2006.
7. R. Jalili, M.Morshed, S. A. Hosseini, Fundamental parameters affecting electrospinning of PAN nanofibers as uniaxially aligned fibers, journal of Applied Polymer Science, Vol 101, Issue 6,4350-4357,2006
8. F.Dabirian, Y. Hosseini, S. A. Hosseini, Manipulation of the electric field of electrospinning system to produce polyacrylonitrile nanofiber yarn, Journal of Textile Institute, In Press
9. Zeinali Heris, S., Etemad, S. Gh., and Nasr Esfahany, M., " Experimental Investigation of Oxide Nanofluids Laminar Flow Convective Heat Transfer", International Communication Heat Mass Transfer, v.33, pp. 529-535, 2006.
10. Nazeri, K., Etemad, S. Gh., and Hojat, M., " Investigation about Heat Capacities of Nanofluids", Proceeding of 1st Nanotechnology in Environments Conference, Isfahan, Iran, Feb. 2007
11. Ahmari, H., and Etemad, S. Gh., " Stability of Nanofluids", Proceeding of 1st Nanotechnology in Environments Conference, Isfahan, Iran, Feb. 2007.
12. Etemad, S.Gh.," Nanotechnology: Environmental and Energy Applications", Keynote Speaking at 10th National Chemical Engineering Conf., Zahedan, Iran, Nov. 2005.
13. Zeinali Heris, S., Etemad, S. Gh., and Nasr Esfahany, M.," Experimental Investigation of Metal Oxide Nanofluid Convection Heat Transfer ", Proceeding of 4th International Nanotechnology Symposium, Dresden, Germany, pp. 181-184, Nov. 2005.
14. Zeinali Heris, S., Nasr Esfahany, M., and Etemad, S. Gh.," Nanofluid Laminar Convection Heat Transfer", Proceeding of 4th International Nanotechnology Symposium, Dresden, Germany, pp. 177-180, Nov. 2005.

15. Akbarzade, H., First principle study of Co<sub>2</sub>MnSi/GaAs(001) heterostructure, Physical Review B ( in press)
16. , Fundamental parameters affecting electrospinning of PAN nanofilters as uniaxially alined fibers, Journal of Applied Polumer Science, 2006
17. The effect of operationg parameters on the morphology of electrospin nonofibers, Iranioan Polymer Journal, V14, No. 12, 2005

۱. ابراهیم شیرانی و عباس صفایی، " بررسی انتقال حرارت به کمک روش شبکه بولتزمن در میکرو کانالها،" پذیرفته شده جهت ارائه در اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۸۵
۲. سعید جعفری و ابراهیم شیرانی، " شبیه سازی جریان در میکرو کانالها و محیط متخلخل با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن،" پذیرفته شده جهت ارائه اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۸۵
۳. سعید جعفری و ابراهیم شیرانی، " شبیه سازی جریان در میکرو کانالها و محیط متخلخل با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن،" پذیرفته شده برای پانزدهمین کنفرانس سالانه (بین المللی) مهندسی مکانیک ایران، ISME2007، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، ۱۳۸۶
۴. عباس صفایی و ابراهیم شیرانی، " شبیه سازی جریان و انتقال گرما در میکرو کانالها با استفاده از روش شبکه بولتزمن،" پذیرفته شده برای اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست، دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۸۵
۵. سعید جعفری و ابراهیم شیرانی " شبیه سازی جریان در هندسه های با ابعاد میکرو به روش شبکه بولتزمن،" مجموعه مقالات چهاردهمین کنفرانس سالانه بین المللی مهندسان مکانیک ایران، دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۸۵
۶. هادی اکبر زاده، " بررسی خواص ساختاری مغناطیسی و الکترونی آلیاژ کروم-نیکل،" مجله پژوهش فیزیک ایران - در دست داوری
۷. هادی اکبر زاده، سخنران مدعو در سیزدهمین کارگاه ماده چگال محاسباتی، دیماه ۱۳۸۵، مرکز فیزیک نظری عبدالسلام، تریست، ایتالیا
۸. هادی اکبر زاده، سخنران مدعو در کنفرانس سالانه ماده چگال، بهمن ۱۳۸۵، دانشگاه فردوسی مشهد
۹. هادی اکبر زاده، ارائه مقاله در اولین کنفرانس نانو فناوری در محیط زیست - اسفند ۱۳۸۵ - دانشگاه صنعتی اصفهان
۱۰. هادی اکبر زاده، ارائه مقاله در کنفرانس سالانه فیزیک، شهریور ۱۳۸۵، دانشگاه شاهرود
۱۱. هادی اکبر زاده، ارائه پوستر در سیزدهمین کارگاه ماده چگال محاسباتی، دیماه ۱۳۸۵، تریست، ایتالیا
۱۲. حسین توانایی، بررسی پارامتر های موثر بر میزان تولید نانو الیاف، مجله علوم و تکنولوژی پلیمر، سال ۱۹، شماره ۲، ۱۳۸۵

## ۵- کنفرانس های برنامه ریزی شده

۱. برنامه ریزی و برگزاری اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست
۲. برنامه ریزی و برگزاری سمینار فناوری نانو در بسته بندی صنایع غذایی
۳. حمایت از ششمین کنفرانس نساجی ایران با هدف تاکید فعالیت های کنفرانس در زمینه نانو الیاف
۴. همکاری در برگزاری و حمایت از مدرسه تابستانه Strongly correlated electron systems

## ۶- فعالیت های آموزشی

۱. جمع آوری اطلاعات و آماده سازی نت های درسی برای ارائه درس "جریان های میکرو و نانو" به عنوان یک درس تحصیلات تکمیلی
۲. جمع آوری اطلاعات در خصوص مطالعات انجام شده در دنیا در زمینه فناوری نانو در بسته بندی صنایع غذایی
۳. تعریف درس تکنولوژی تولید الیاف نانو
۴. جمع آوری اطلاعات و آماده سازی نت های درسی برای ارائه درس "افزایش انتقال حرارت و نانو تکنولوژی" به عنوان یک درس تحصیلات تکمیلی
۵. جمع آوری اطلاعات و آماده سازی نت های درسی برای ارائه درس "نانو تکنولوژی وانرژی" به عنوان یک درس کارشناسی

### ضمیمه ۱ - طرح‌های تحقیقاتی

**1-1 عنوان طرح:** بررسی جذب سطحی آلاینده‌ی CO بر روی سطح (۱۱۱) فلزات واسطه‌ی Pt و Cu، با

محاسبات میکروسکوپی کوانتومی

**مجری:** دکتر هادی اکبرزاده (عضو هیات علمی)

**همکاران:** حجت قلی زاده (دانشجوی کارشناسی ارشد) - مجتبی اعلائی (دانشجوی دکتری)

مطالعه‌ی خواص و ویژگی‌های سطوح مواد در مقیاس اتمی و مولکولی در شاخه‌های مختلف علوم و فناوری نانو از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. هدف فناوری نانو طراحی و ساخت ابزارهای کارآمد در زمینه‌های مختلف و در مقیاس‌های بسیار کوچک (عموماً بین چند تا چندصد نانومتر) است. از مهمترین زمینه‌های مورد توجه در نانوفناوری، می‌توان به تحقیق بر روی روش‌ها و ابزارهای مؤثر در حفظ محیط زیست اشاره کرد. در این شاخه از علوم و فناوری نانو، با هدف حفظ محیط زیست مطلوب و ترمیم آسیب‌های موجود در آن، تلاش‌ها در دو راستا ادامه دارد:

۱. طراحی و ساخت وسایل و ابزار مورد نیاز بشر، به طوری که در مقایسه با نمونه‌های فعلی آسیب و تهدید کمتری برای محیط زیست داشته باشد (رهیافت پیشگیرانه).

۲. تهیه‌ی سامانه‌های کارآمد برای رفع آلودگی‌های موجود در محیط زیست و ترمیم آسیب‌های غیرقابل پیش‌گیری و موجود در محیط زیست (رهیافت درمانی).

از زمینه‌های تحقیقاتی فعال در رهیافت اول می‌توان به شاخه‌های مختلف علم نوظهور اسپینترونیک اشاره کرد. این حوزه‌ی مشترک در علوم نانو و علم مواد تلاش دارد تا با طراحی و ساخت ابزارهای زندگی به صورتی که علی‌رغم کارآیی بالاتر، مصرف مواد اولیه و انرژی در آن‌ها کمتر باشد از آسیب بیشتر به محیط زیست جلوگیری نماید.

از سوی دیگر رفع آلودگی‌های موجود در محیط زیست اعم از آب، خاک و هوا، از زمینه‌های مورد علاقه در رهیافت دوم است. اغراق نخواهد بود اگر تلاش برای کاهش و رفع آلودگی هوا را مهم‌ترین و مؤثرترین اقدام برای حفظ محیط زیست بدانیم. یک روش بسیار مؤثر برای نیل به این هدف، استفاده از کاتالیزور برای تبدیل آلاینده‌های موجود در هوا به فرآورده‌های بی‌خطر یا کم‌خطرتر است. کاتالیزور با کاهش ارتفاع سد انرژی فعال‌سازی واکنش، می‌تواند سرعت واکنش را تا هزاران برابر افزایش دهد. کاتالیزورها از مدت‌ها پیش شناسایی و در صنایع مختلف شیمی و پتروشیمی به کار رفته‌اند، اما تلاش برای یافتن کاتالیزورهای بهتر و کارآمدتر همچنان ادامه دارد. یکی از رویاهای علوم و فناوری نانو، شناخت و ساخت کاتالیزورهای هوشمند است که البته بدون شناخت کامل و دقیق رفتار کاتالیزورهای موجود دست‌یافتنی نخواهد بود. از این رو مطالعات نظری، تجربی و محاسباتی زیادی به منظور شناخت رفتار میکروسکوپی کاتالیزورها و گسترش کارآیی آن‌ها در حال انجام است. برای درک رفتار و

اندرکنش‌های یک کاتالیزور در یک واکنش، باید خواص و ویژگی‌های سطح کاتالیزور و واکنش‌دهنده‌ها را بدانیم. گام اول در هر واکنش کاتالیزوری، جذب سطحی واکنش‌دهنده‌ها بر روی سطح کاتالیزور است. این نکته در کنار اهمیت جذب سطحی در زمینه‌های کاربردی و نظری مهم دیگر، مانند مطالعات اصطکاک‌سنجی (در علوم هوافضا و مکانیک سیالات)، حسگرهای حساس به گاز (در علوم الکترونیک) و ...، سبب شده است تا جذب سطحی مولکول‌های گازی بر روی سطوح فلزات واسطه توجه زیادی را به خود جلب نماید. در این میان یکی از معروف‌ترین و جالب‌ترین زمینه‌هایی که در چند دهه‌ی اخیر همواره مورد توجه بوده است، بررسی و مطالعه‌ی چگونگی جذب سطحی مولکول مونوکسید کربن، CO، روی سطوح مختلف فلزات واسطه است. جذب سطحی CO روی سطوح فلزی، یک مرحله‌ی تعیین‌کننده برای چند واکنش کاتالیزوری پرکاربرد نظیر اکسیداسیون و هیدروژن‌سازی است. علاوه بر آن به دلیل سادگی و کوچکی، این مولکول به یک مولکول مقیاس در علوم سطح تبدیل شده است. اما اگر بخواهیم انگیزه‌ی اصلی برای مطالعه‌ی جذب سطحی CO روی سطوح فلزی را نام ببریم، بی‌شک باید به اهمیت فنی و کاربردی واکنش کاتالیزوری اکسیداسیون CO و تبدیل این گاز خطرناک و سمی به گاز کم‌خطرتر CO<sub>2</sub> اشاره کنیم.

واکنش تبدیل CO به CO<sub>2</sub> در حالت عادی بسیار کند است، به طوری که می‌توان از آن صرف‌نظر کرد. افزایش سرعت واکنش نیازمند افزایش دما و غلظت اکسیژن و یا استفاده از کاتالیزور است. با توجه به صرفه‌جویی قابل توجه در مصرف انرژی و نیز ماندگاری بالا، استفاده از کاتالیزور اهمیت ویژه‌ای پیدا می‌کند. CO گازی سمی و بسیار خطرناک است و در مجموع چیزی در حدود ۱۰٪ از موجودی آن در کل جو ناشی از فعالیت‌های انسانی است. اما آنچه وضعیت را بحرانی می‌کند، توزیع نایک‌نواخت و تجمع خطرناک این گاز سمی در محدوده‌ی شهرها است که به دلیل فعالیت‌های صنعتی و به ویژه از طریق خروج از آگروز خودروها و سایر موتورهای درون‌سوز اتفاق می‌افتد. به طور مثال حدود ۹۵ تا ۹۸ درصد CO موجود در جو یک منطقه‌ی شهری ناشی از فعالیت‌های انسانی است. از این جاست که یافتن راهی برای کاهش تولید و نیز تبدیل این فراورده اهمیت می‌یابد. از میان راه‌های متفاوت برای مقابله با این خطر، آنچه در کوتاه‌مدت مفیدتر به نظر می‌رسد، استفاده از مبدل‌های کاتالیستی در آگروز موتورهای درون‌سوز است. مطالعات نشان داده است که استفاده از یک نوع پیشرفته از مبدل کاتالیستی (موسوم به مبدل‌های سه‌راهه) در موتورهای بنزینی توانایی کاهش بیش از ۷۰٪ آلاینده‌های خروجی ناشی از هیدروکربن‌های نسوخته در موتور را دارد. همچنین این مبدل کاتالیستی می‌تواند تا ۵۰٪ آلاینده‌های اکسیدنیترژن در موتورهای بنزینی و حداقل ۳۰٪ آلاینده‌های خروجی موتورهای دیزلی را کاهش دهد. این گونه مبدل‌ها از دهه‌ی ۱۹۷۰ در ایالات متحده و از دهه‌ی ۱۹۸۰ در اروپا به کار گرفته شده‌اند. امروزه بیش از نیمی از خودروهای موجود در جهان و حدود ۸۰٪ از خودروهای در حال تولید مجهز به مبدل‌های کاتالیستی هستند. این مبدل‌ها ضمن اکسیداسیون گازهای CO و HC، احیای گازهای NO و NO<sub>2</sub> را نیز تسریع می‌کنند و قادرند تا ۹۵٪ از آلودگی‌های موجود در خروجی آگروز را کاهش دهند. کاتالیزورهای به‌کاررفته در این مبدل‌ها معمولاً ترکیبی از فلزات پلاتین، Pt، مس، Cu، پالادیوم، Pd و رودیوم، Rh، هستند. Pt، Pd و Cu در واکنش اکسیداسیون CO و هیدروکربن‌های نسوخته، مانند HC، شرکت می‌کنند. به‌ویژه Pt برای اکسیداسیون پارافین و هیدروکربن‌های آروماتیک مناسب است. Rh در واکنش احیای اکسیدهای نیترژن به نیترژن خالص شرکت می‌کند، ضمن آنکه

ظرفیت بالایی در نگهداری اکسیژن دارد. بدین ترتیب به کاربردن یک مخزن متخلخل با سطح پوشیده شده از حدود ۱/۵ گرم Pt یا Pd می‌تواند کمک بسیار مؤثری به حفظ محیط زیست نماید. از این‌روست که بررسی نحوه‌ی اندرکنش مولکول CO با سطح فلزاتی نظیر Pt، Pd و Cu اهمیت خاصی می‌یابد.

آنچه امروزه در مطالعه‌ی جذب سطحی CO روی سطح فلزاتی مانند Pt، Cu و Rh توجه زیادی را در رشته‌های فیزیک، شیمی و علوم سطح به خود جلب کرده، مقایسه‌ی جایگاه‌های ارجح جذب سطحی به‌دست آمده از روش‌های مختلف محاسباتی مبتنی بر نظریه‌ی تابعی چگالی با مشاهدات تجربی است. در بررسی جذب سطحی مولکول CO روی سطوح فلزات نامبرده مانند سطوح Pt(۱۱۱)، Cu(۱۱۱) و Rh(۱۱۱)، روش‌های مختلف و متداول محاسباتی که مبتنی بر نظریه‌ی تابعی چگالی، DFT<sup>۱</sup>، هستند به اتفاق پیش‌بینی می‌کنند که در پوشش‌های کم، جذب در جایگاه‌های بین اتم‌های سطحی پایدارتر است از جذب بر روی اتم‌ها. این در حالی است که مشاهدات تجربی مختلف به اتفاق گزارش داده‌اند که در پوشش‌های کم جذب دقیقاً بر روی اتم‌ها اتفاق می‌افتد.

تاکنون دلایل مختلفی برای این نقص پیشنهاد شده است. در این مطالعه سعی شد با انتخاب دقیق‌تر پارامترهای محاسباتی (از قبیل استفاده از تقریب پتانسیل برهمکنش تبادل-همبستگی بهتر و پیشرفته‌تر، در نظر گرفتن تأثیر مراتب بالای تصحیحات نسبی و...) در بسته‌ی نرم‌افزاری محاسبات ماده چگال WIEN2k، درک بهتری از برهمکنش مولکول CO با سطح فلز به‌دست آید. در پایان این تحقیق نتایج مهمی به دست آمد که پاره‌ای از آن‌ها در قالب مقاله‌ای تحت عنوان «بررسی جذب سطحی آلایندگی CO بر روی سطح Pt(۱۱۱) با محاسبات میکروسکوپی کوانتومی» برای ارائه‌ی سخنرانی در «اولین کنفرانس فناوری نانو در محیط زیست» که در روزهای دوم و سوم اسفندماه ۱۳۸۵ در دانشگاه صنعتی اصفهان برگزار خواهد شد پذیرفته شده است. با یاری خداوند سایر نتایج به‌دست آمده از این مطالعه نیز در نشریات داخلی و خارجی ارائه خواهد شد.

## 1-2 عنوان طرح: مطالعه اثر مشترک الیاز هویسلر CO<sub>2</sub>MnSi با زیرلایه GaAs

**مجری:** دکتر هادی اکبرزاده (عضو هیات علمی)

**همکاران:** ناهید قادری (دانشجوی دکتری) - سید جواد هاشمی فر (دانشجوی دکتری)

این طرح با موفقیت به انجام رسید و حاصل آن بصورت یک مقاله در مجله Physical Review B در دست داوری است (نسخه‌ای از این مقاله ضمیمه گزارش است). اضافه بر آن یک سخنرانی مبسوط (بعنوان سخنران مدعو) در سیزدهمین کارگاه ماده چگال محاسباتی در مرکز فیزیک نظری عبدالسلام (ICTP) واقع در تریست ایتالیا ارائه گردید. سخنرانی دیگری نیز در کنفرانس ماده چگال که از طرف انجمن فیزیک در دانشگاه فردوسی مشهد برگزار شد ارائه گردید.

### 3-1 عنوان طرح: بررسی خواص ساختاری، مغناطیسی و الکترونی مرز مشترک $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}/\text{GaAs}$ در راستای [001]

مجری: دکتر هادی اکبرزاده (عضو هیات علمی)

همکار: ساره زارعی (دانشجوی کارشناسی ارشد)

یکی از مسائل مهم در زمینه اسپینترونیک تزریق جریان اسپینی از یک فلز فرو مغناطیس به نیم رسانا است. در سالهای اخیر فرو مغناطیس های نیم فلز، بدلیل توانایی بالا در تولید جریان قطبیده اسپینی مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته اند که آلیاژهای هویسلر از این دسته هستند. نیم فلزها موادی هستند که برای یک نوع اسپین رفتار فلزی و برای نوع دیگر رفتار نیم رسانایی دارند. لذا این مواد در سطح فرمی دارای قطبش اسپینی ۱۰۰٪ هستند. در بسیاری از مواد گرچه خاصیت نیم فلزی در انبوهه بروز می کند لیکن تجربه نشان داده است که این خاصیت در مرز مشترک این مواد با نیم رساناها به علت حضور اثرات مرز مشترک که از بی نظمی اتمی ناشی می شود از بین می رود. بنابراین مطالعه اتصال بین نیم فلز و نیم رسانا بویژه بررسی اثرات مرز مشترک بر روی خواص مغناطیسی و الکترونی آنها بسیار مهم است. ترکیب  $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$  از جمله آلیاژهای هویسلر است که خاصیت نیم فلزی در حالت انبوهه آن پیش بینی شده است. از مزایای این آلیاژ هویسلر دمای کوری بالا (۶۶۵K) و مغناطیسمقاومت تونلی بزرگی در حدود (۳۷٪) در میدان ۰,۲۵ تسلا است. بنا بر اطلاعات ما تا کنون مرز مشترک این آلیاژ با نیم رسانا مورد بررسی قرار نگرفته است و بنابراین مشخص نیست که آیا قطبش بالا که در انبوهه آلیاژ مشاهده در مرز مشترک آن با نیم رسانا نیز حفظ می شود؟ همین امر باعث شد که ما مرز مشترک این ترکیب با GaAs که از نیم رساناهای متعارف در صنعت الکترونیک است را برای بررسی انتخاب کنیم. در این ریاله با استفاده از نرم افزار ESPRESSO در ابتدا خواص انبوهه آلیاژ  $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}$  که از نظر ساختاری به ترکیب  $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$  بسیار نزدیک است و از طرفی ابر یاخته کوچکتری نیز در مقایسه با آن دارد ارائه شده است. نتایج حاصل از انبوهه حضور خاصیت نیم فلزی در آلیاژ را تأیید می کند. در ادامه مرز مشترک  $[\text{Co}_2\text{Cr}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}/\text{GaAs}]$  شبیه سازی شده و خواص الکترونی و مغناطیسی این مرز مشترک با استفاده از محاسبات اولیه کوانتومی در چارچوب نظریه تابعی چگالی اسپینی و با بکارگیری رهیافت شبه پتانسیل مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج بررسی مرز مشترک های مختلف این آلیاژ با نیم رسانا نشان می دهد که خاصیت نیم فلزی در تمامی مرز مشترک ها کاهش می یابد. با این حال پائانش  $\text{CrAl-As}$  علاوه بر اینکه پایدارترین مرز مشترک است، قطبش اسپینی آن در حد بالایی (۷۸٪) باقی می ماند. ضمناً نتایج ما از بررسی مرز مشترک تغییر یافته  $\text{CrCr-As}$  نشان می دهد که با جایگذاری اتم Cr به جای Al در پائانش  $\text{CrAl-As}$  قطبش اسپینی در مرز مشترک افزایش می یابد. در پایان ناپیوستگی نواری و مقدار سد شاتکی در مرز مشترک محاسبه شدند.

نتایج حاصل از این پروژه در قالب مقاله و پوستر در داخل و خارج کشور ارائه شده است که در زیر آمده است:

1. S. Zarei, N. Ghaderi, S. J. Hashemifar, H. Akbarzadeh, " Half-Metallicity at  $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}/\text{GaAs}[001]$  Heterostructures" Poster, 13<sup>th</sup> International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods", Trieste, Italy, January 2007.
2. S. Zarei, S. J. Hashemifar, H. Akbarzadeh, "Theoretical study of structural and electronic properties of  $\text{Co}_2\text{Cr}(0.5)\text{Fe}(0.5)\text{Al}$  Heusler alloy compound

#### 4-1 عنوان طرح: بررسی سطح [001] آلیاژ هویسلر $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}$

مجری: دکترهادی اکبرزاده (عضو هیات علمی)

همکار: زهره حفاری (دانشجوی کارشناسی ارشد)

یکی از مباحث جدید علمی که امروزه توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است مبحث اسپینترونیک است. در علم اسپینترونیک با نگرشی متفاوت به ویژگیهای الکترون تلاش می شود که کارایی ابزارهای الکترونیکی افزایش یابد. به عبارت دیگر از اسپین الکترون علاوه بر بار آن برای انتقال اطلاعات و مفاهیم استفاده می شود. پدیده ای که در مواد فرومغناطیس بکار رفته در ابزارهای اسپینترونیکی مد نظر است نابرابری تعداد الکترونها دارای اسپین اکثریت و اقلیت است. لذا هر چه قطبش اسپینی این مواد بالاتر باشد قابلیت بیشتری برای استفاده در ابزارهای اسپینترونیکی دارند. بنابراین فرومغناطیسهای نیم فلز با داشتن قطبش اسپینی ۱۰۰٪ گزینه های مناسبی برای این منظور هستند. در منحنی چگالی حالات الکترونی این مواد در انرژی فرمی تنها الکترونها با یک نوع اسپین وجود دارد. در بین نیم فلزات آلیاژهای هویسلر به خاطر داشتن دمای کوری بالا در ارجحیت قرار می گیرند. یکی از این ترکیبات آلیاژ هویسلر  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  است که خاصیت نیم فلزی آن در مطالعات نظری تایید شده است. همچنین مشاهده شده است که اگر این ترکیب را با آهن آلیاژ دهند دمای کوری ترکیب حاصل یعنی  $\text{Co}_2\text{Cr}_{(1-x)}\text{Fe}_x\text{Al}$  افزایش می یابد. در مشاهدات تجربی و نظری دیده شده است که این ترکیب در غلظت  $x=0.4$  از اتم آهن علاوه بر داشتن دمای کوری بالا بیشترین مقاومت مغناطیسی را از خود نشان می دهد (مقاومت مغناطیسی به تغییر مقاومت الکتریکی مواد در حضور میدان مغناطیسی خارجی گفته می شود و یکی از معیارهای انتخاب مواد سازنده قطعات اسپینترونیکی می باشد). پس می توان گفت که این غلظت برای بررسی در اولویت قرار دارد. نکته دیگری که باید به آن توجه داشت این است که در عمل با سطوح و مرز مشترک مواد سروکار داریم. خواص مواد از جمله خاصیت نیم فلزی نیز ممکن است تحت تاثیر عوامل مختلفی مانند آثار سطحی تغییر کند. بنابراین تصمیم بر آن شد که سطح آلیاژ  $\text{Co}_2\text{Cr}_{(1-x)}\text{Fe}_x\text{Al}$  به ازای  $x=0.4$  در راستای [001] مورد بررسی قرار گیرد. اما از آنجا که بررسی سطح این ترکیب نیاز به ابرسلول بزرگی داشت غلظت  $x=0.5$  انتخاب شد که ابرسلول کوچکتری نیاز دارد و حجم محاسبات آن کمتر است.

در این پروژه ابتدا خواص انبوهه این ترکیب استخراج شد و خاصیت نیم فلزی آن در این حالت تایید شد. همچنین دیده شد که در این ترکیب اتمهای Co هم با همسایگان مرتبه اول خود یعنی اتمهای Fe و Cr و هم با همسایگان مرتبه دوم یعنی دیگر اتمهای Co پیوند دارند. با تخمین انرژی پیوند مشاهده شد که پیوند Co-Cr از دیگر پیوندهای اتم Co قویتر است. سپس به بررسی سطوح مختلف این آلیاژ در راستای [001] یعنی سطوح CoCo با لایه زیرین CrAl، CoCo با لایه زیرین FeAl، CrAl و FeAl پرداختیم. در بررسی این سطوح از ابرسلولهای ۱۵ لایه ای و ۱۷ لایه ای با خلا ۱۶ a.u. استفاده شد. با واهلش این ابر سلولها دیدیم که فواصل بین لایه ای با دور شدن از سطح به طور نوسانی به مقدار ایده آل در حالت انبوهه نزدیک می شود. این رفتار که از نوسانات

چگالی بار ناشی می شود به نوسانات فریدل موسوم است. در تمامی این سطوح دیده شد که خاصیت نیم فلزی از بین می رود. با این حال بیشترین قطبش اسپینی در سطح CrAl برابر با ۷۸٪ اندازه گیری شد. در بررسی حالات سطحی در منحنی چگالی الکترونی دیده شد که دو اثر پتانسیل سطحی که ناشی از افزایش انرژی الکترونها در سطح می باشد و تقویت سطحی تبادل که از کاهش تعداد همسایگان و تضعیف پیوند در سطح ناشی می شود، در از بین بردن خاصیت نیم فلزی دخیل هستند. همچنین دیدیم که در سطح CoCo با لایه زیرین CrAl اثر تقویت سطحی تبادل به دلیل پیوند قوی بین اتمهای Co و Cr تا حدودی تضعیف می شود. به طور کلی بیشترین حالات سطحی متعلق به اتم Co هستند که پیوند آن در سطح به دلیل از دست دادن نیمی از همسایگان مرتبه اول و دوم تضعیف می شود. در ادامه به بررسی سطح تغییر یافته CrCr پرداختیم که از جایگزین کردن اتم Al با اتم Cr در سطح CrAl بدست می آید. در این حالت دیده شد که حالات سطحی موجود در سطح CrAl به طور کامل از بین می روند. لذا می توان گفت با پوشش این آلیاژ توسط یک لایه از اتمهای Cr خاصیت نیم فلزی آن حفظ می شود. در نهایت به منظور بررسی پایداری نسبی این سطوح نمودار فاز با استفاده از نظریه ترمودینامیکی ابتدا به ساکن رسم شد. در این روش پتانسیل شیمیایی اتمهای موجود در ترکیب به عنوان پارامتر آزاد در نظر گرفته می شوند که می توانند تحت تاثیر شرایط آزمایشگاهی همانند دما و فشار تغییر کنند. با رسم این نمودار دیده شد که تنها سطح CrAl در محدوده مجاز تغییرات پتانسیل شیمیایی قرار دارد و می توان آن را در آزمایشگاه رشد داد.

### 5-1 عنوان طرح: بررسی خواص ساختاری، مغناطیسی و الکترونی آلیاژ $Ni_xCr_{1-x}$ در غلظت های

$$X = \{0.125, 0.25, 0.375, 0.5, 0.625, 0.75, 0.875\}$$

مجری: دکترهادی اکبرزاده

همکاران: رستم گل سرخ تبار (کارشناسی ارشد)، سیدجواد هاشمی فر (دانشجوی دکتری)

خواص ساختاری، مغناطیسی و الکترونی آلیاژ  $Ni_xCr_{1-x}$  در غلظت های متعددی در گستره  $0.125 \leq x \leq 0.875$  با روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل بر پایه نظریه تابعی چگالی محاسبه شد. در بررسی خواص ساختاری، انرژی تشکیل، پارامتر شبکه و مدول انبوه آلیاژها در ساختارهای *bcc* و *fcc* و فازهای فرو مغناطیس و فری مغناطیسی محاسبه شد. نتایج حاصل از محاسبه حاکی از آن است که تمایل به تشکیل آلیاژ در محدوده  $x=0.78 - 0.6$  از بقیه غلظت ها بیشتر است. ضمناً در محاسبات ما یک گذار فاز ساختاری از *bcc* به *fcc* در غلظت  $x=0.22$  و یک گذار فاز مغناطیسی از فری مغناطیس به فرومغناطیس در محدوده غلظت  $x=0.75 - 0.875$  مشاهده شد. مطالعه ی پارامتر شبکه و مدول انبوه نشان می دهد که پیوند *Cr-Ni* در مقایسه با پیوندهای *Cr-Cr* و *Ni-Ni* ضعیف تر است. با بررسی نتایج مغناطیسی آلیاژها مشخص شد که برهم کنش مغناطیسی اتم ها در ساختارهای *bcc* احتمالاً از نوع *RKKY* است. محاسبه ی انرژی مغناطیسی و قطبیدگی اسپینی در سطح فرمی نشان داد که آلیاژ  $Ni_{0.75}Cr_{0.25}$  با ساختار *fcc* و قطبیدگی اسپینی حدود ۹۰ در صد دارای بیشترین پایداری مغناطیسی، ساختاری است.

## 6-1 عنوان طرح: بررسی اثر تعداد لایه ها در شبیه سازی های سطوح در فلزات واسطه

مجری: دکتر هادی اکبرزاده

همکار: مجتبی اعلائی ( دانشجوی دکتری)

سطوح فلزات واسطه به عنوان کاتالیزور بسیار حایز اهمیت هستند و به این علت در دهه اخیر شبیه سازی های کوانتومی بر روی این سطوح نیز بشدت افزایش یافته است. در این نوع شبیه سازی ها برای اینکه سطح را شبیه سازی نماییم بایستی تقارن بلوری در جهت عمود بر سطح را حذف کنیم و برای این کار در جهت محور  $Z$  تعدادی لایه همراه با یک خلا در حدود ده انگستروم در نظر گرفته می شود. تعداد لایه ها چیزی است تقریباً اختیاری و بسته به شبیه سازی با معیارهای مختلفی این تعداد انتخاب میشود. اخیراً نشان داده شده است که تعداد لایه ها در شبیه سازی سطح فلز آلومینیم باید بیش از ۲۰ لایه باشد تا بتوان تغییرات بر روی سطح را بدرستی پیش بینی کرد.

در شبیه سازی های سطوح فلزات واسطه معمولاً از ۵ تا ۷ لایه استفاده می شود. به این دلیل ما به بررسی اثر تعداد لایه ها در سه ستون از عناصر واسطه می پردازیم که عبارت اند از:

Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Co, Rh, Ir. انتخاب این عناصر به این علت بوده است که این عناصر کاربرد زیادی در صنعت به عنوان کاتالیزور دارند. در این تحقیق ما بر روی اثر تعداد لایه ها بر باز آرایشی سطوح و همچنین اثر تعداد لایه ها بر انرژی جذب مولکول های CO و NO می پردازیم.

## 7-1 عنوان طرح: مطالعاتی کاربرد نانو تکنولوژی در صنایع نساجی

مجری: دکتر محمد مرشد

همکاران: دکتر سید عبدالکریم حسینی و مهندس روح اله جلیلی

نانو تکنولوژی به عنوان انقلابی در شرف و قوع، آینده اقتصادی کشورها و جایگاه آنها در جهان را تحت تاثیر جدی قرار خواهد داد در سال های اخیر تحركات شدیدی از طرف دولتها برای سرعت بخشیدن به توسعه نانو تکنولوژی صورت گرفته است. در این تحقیق به وضعیت جهانی نانو تکنولوژی در صنعت نساجی، پیشرفت ها، محصولات و پیش بینی های صورت گرفته پرداخته شد. سپس وضعیت نانو تکنولوژی در ایران در مقیاس جهانی بررسی و مقایسه ای میان فعالیت های انجام شده در ایران با کره جنوبی در حوزه های عملی و تحقیقاتی صورت گرفت. با توجه به تحقیقات صورت گرفته، تولید و به کارگیری نانو الیاف به عنوان یک روش موفق معرفی شده و به روش های تولید آن خصوصاً الکترووریسی پرداخته و کاربردهای آن معرفی گردیدند.

جهت مشخص نمودن فرصت ها و موانع بکارگیری نانو تکنولوژی در صنعت نساجی به مواردی نظیر، ویژگیهای نانو تکنولوژی، شرایط جهانی، ویژگیهای کشور، مزایای حاصل از بکارگیری نانو تکنولوژی، وضعیت صنعت نساجی در ایران و محورهای دارای اولویت مورد توجه قرار گرفت. در نهایت با توجه به دست آوردهای این تحقیق، جهت بکارگیری نانو تکنولوژی در صنعت نساجی پیشنهادات و راهکارهایی به دولت ارائه شد.

## 8-1 عنوان طرح: تدوین یک برنامه محاسباتی برای شبیه سازی جریان سیال همراه با انتقال حرارت در میکروکانالها

مجری: دکتر ابراهیم شیرانی

هدف از انجام این طرح توسعه یک برنامه کامپیوتری برای شبیه سازی جریان سیال و انتقال حرارت با ابعاد میکرو بکمک روش شبکه بولتزمن است. به طور اخص به کارگیری و تست شرایط مرزی پخش مولکولی برای بررسی سرعت لغزشی و پرش دمایی روی دیوار و نیز اعمال برنامه محاسباتی تدوین شده روی چند مورد مد نظر می باشد. برنامه کامپیوتری توسعه داده شده از روش شبکه بولتزمن استفاده کرده و قابلیت شبیه سازی جریان سیال و انتقال حرارت در مجاری با هندسه های مختلف و ابعاد مختلف و در رژیم های پیوسته، لغزشی و رژیم گذار را دارد. شرایط استفاده شده در این برنامه کامپیوتری شرط مرزی پخش مولکولی روی دیوار و شرط مرزی ساکی برای دمای ورودی و خروجی می باشد. همچنین برای محاسبه زمان آرامش از روش وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن استفاده شده است.

در ابتدا یک برنامه کامپیوتری اولیه تهیه شد که جریان سیال بدون انتقال گرما را بین دو صفحه با رانش اختلاف فشار شبیه سازی می کرد. در ادامه علاوه بر ایجاد تغییرات در بخش هیدرودینامیکی برنامه و بررسی شرایط مرزی پخش مولکولی و شرایط مرزی سرعت ورودی، شبیه سازی انتقال حرارت بکمک روش شبکه بولتزمن به آن افزوده شد. به منظور اطمینان یافتن از صحت برنامه کامپیوتری، ابتدا این برنامه کامپیوتری با استفاده از روش شبکه بولتزمن برای چند مورد با ابعاد ماکرو شامل جریان سیال و انتقال حرارت در حفره با اعداد رینولدز متفاوت و جریان کوئت بررسی و نتایج با نتایج حاصل از حل معادلات ناویر-استوکز و معادله فوریه برای انتقال حرارت مقایسه گردید و صحت برنامه کامپیوتری و دقت جوابها بررسی شد. این بررسی نشان داد که برنامه کامپیوتری تهیه شده دارای دقت مناسب بوده و روش شبکه بولتزمن قادر است جریان های سیال همراه با انتقال گرما را در رژیم ماکرو بخوبی شبیه سازی کند. سپس روش شبکه بولتزمن برای هندسه های با ابعاد میکرو شامل جریان سیال و انتقال حرارت در میکروکانال ها، میکرو حفره ها و جریان میکرو کوئت با اعداد نودسن مختلف با استفاده از اعمال شرط مرزی پخش مولکولی و وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن شبیه سازی شد. نتایج حاصل از حل جریان و انتقال حرارت در ابعاد میکرو با روشهای مونت کارلو، دینامیک مولکولی و ماکسول مقایسه شد که نشان داد که برنامه کامپیوتری تهیه شده با استفاده از روش شبکه بولتزمن قادر است جریان سیال همراه با انتقال گرما را در رژیم گذار (در هندسه های با ابعاد میکرو) نیز بخوبی و با دقت بسیار بالا شبیه سازی کند. همچنین میزان انتقال حرارت (عدد ناسلت) در طول ورودی کانالهای با ابعاد میکرو و ماکرو با هم مقایسه شد. نتایج مقایسه، تغییرات قابل توجه میزان انتقال حرارت در طول ورودی را در جریان های میکرو نسبت به جریان های ماکرو نشان می دهد.

## ضمیمه ۲- رساله های دکتری

1-2 نام دانشجو: محمود رضا خانگی

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

**عنوان رساله:** بررسی خواص حرکتی و حرارتی نانو سیالات نیوتنی و غیرنیوتنی

اگر ذرات جامد در ابعاد نانومتر را در یک سیال بصورت معلق حل کنیم به قسمی که یک سوسپانسیون پایدار بوجود آید، سیال حاصل را سیال نانوتنی می نامند آزمایشات نشان داده است که سیالات نانوتنی حاصل حل کردن نانو ذرات فلزی یا نانو ذرات اکسید فلزات می تواند خصوصیات حرارتی، از جمله هدایت حرارتی و ضریب انتقال حرارت سیال را به میزان قابل توجهی افزایش دهد. از آنجا که جنبه های مختلف انتقال حرارت در صنایع شیمیایی، داروسازی و غذایی از اهمیت ویژه ای برخوردار است، این موضوع تاثیر قابل توجهی بر صرفه جویی مصرف سوخت، کاهش ابعاد دستگاههای تبادل حرارت و جلوگیری از آلودگی محیط زیست در این صنایع خواهد داشت. در این پروژه هدف بررسی رفتار سیال نانوتنی در فرآیند انتقال حرارت جابجایی آزاد برای سیالات نیوتنی و غیرنیوتنی به وسیله آزمایش عملی می باشد. در این آزمایشات از نانو ذرات با جنس و ابعاد متفاوت و با درصد حجمی های مختلف استفاده خواهد شد.

2-2 نام دانشجو: محمد حجت

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

**عنوان رساله:** اندازه گیری ضریب انتقال حرارت جابجایی نانو سیالات غیر نیوتنی در لوله مدور با اعمال شرایط مرزی متفاوت

با پخش کردن نانو مواد در سیال، نوع جدیدی از سیال به وجود می آید که نانو سیال نامیده می شود. تحقیقات تجربی و تئوری مختلفی روی رفتار حرارتی و حرکتی نانو سیالات صورت پذیرفته است و تقریباً نتایج همه این تحقیقات مبین افزایش قابل ملاحظه ضریب هدایت حرارتی و هم چنین ضریب انتقال حرارت جابه جایی نانو سیالات نسبت به سیال پایه می باشند، بنابر این انتظار می رود استفاده از نانو سیالات انقلابی در زمینه انتقال حرارت ایجاد نماید. لازم به ذکر است که در تمام تحقیقات انجام گرفته، از سیالات پایه نیوتنی استفاده شده است. نظر به این که تا کنون هیچ کار تحقیقاتی در زمینه بررسی اثر افزودن نانوذرات به سیال پایه غیرنیوتنی انجام نگرفته و با توجه به این که بسیاری از سیالات مورد استفاده در صنایع بزرگ نظیر صنایع پتروشیمی غیرنیوتنی می باشند، در این تحقیق اثر افزودن نانوذره به سیال پایه غیرنیوتنی - که از قانون توانی تبعیت می نماید - روی ضریب انتقال حرارت جا به جایی سیال در لوله مدور با اعمال دو شرط مرزی دمایی ثابت دیواره و شار حرارتی ثابت در دیواره مورد بررسی قرار می گیرد.

به طور خلاصه هدف بررسی اثر نوع نانوذره، استفاده همزمان از نانوذرات مختلف، غلظت نانوذره و عدد رینولدز روی ضریب انتقال حرارت سیال غیر نیوتنی در لوله مدور با اعمال دو شرط مرزی متفاوت در دیواره می باشد.

## 3-2 نام دانشجو: محمد نصیری

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

**عنوان رساله:** تعیین ضریب هدایت حرارتی نانوسیال با استفاده از تئوریهای مختلف

افزودن ذرات جامد فلزی و اکسیدی در اندازه نانومتری به سیالات متداول انتقال حرارت نظیر آب؛ اتیلن گلیکول و روغن سبب افزایش قابل ملاحظه ضریب هدایت حرارتی سوسپانسیون حاصل (نانوسیال) می گردد. تخمین و پیش بینی ضریب هدایت حرارتی نانوسیال با استفاده از مدل‌های کلاسیک موجود نظیر مدل ماکسول - گارنت بخصوص اگر غلظت نانوسیال بالا باشد توام با خطای قابل توجهی است. بهمین دلیل تلاشهای علمی در جریان است تا با اصلاح مدل‌های کلاسیک یا با ارائه مدل‌های جدید معادلاتی برای تخمین و تعیین ضریب هدایت حرارتی نانوسیال بدست آید. یکی از روشهای مفید در این رابطه می تواند استفاده از شبیه سازی دینامیک ملکولی باشد.

در این پایان نامه در نظر است تا با تبیین نیروهای حاکم بر سیستم و نوشتن انرژی پتانسیل این نیروها با استفاده از نرم افزارهایی مانند HyperChem و گوسین و یا در صورت لزوم نوشتن کد کامپیوتری معادلات مربوطه حل شده و ضریب هدایت حرارتی سیستم نانو ذره - سیال تعیین گردد.

## 4-2 نام دانشجو: محمد ابراهیم پور

استاد راهنما: دکتر محمود سلیمی

**عنوان رساله:** ساخت نمونه های آزمایشگاهی ورقهای نانو ساختار به روش ARB

شبیه سازی المان محدودی خواص مکانیکی ورقهای نانو ساختار تهیه شده به روش ARB (Accumulative Roll Bonding) و ساختن نمونه های آزمایشگاهی و تست های تجربی از این ورقها به واسطه خواص منحصر به فرد از قبیل استحکام بالا، مقاومت به سایش، مقاومت به خستگی، سختی بالا، خواص نوری و مغناطیسی عالی و خواص عالی و خواص سوپر پلاستیسته نسبت به مواد با دانه بندی درشت در صنایع مختلف از قبیل الکترونیک، خودرو سازی هوا فضا، صنایع دفاعی، ... کاربرد گسترده ای پیدا کرده اند بنابراین ساخت این ورقها جز اهداف اصلی و اساسی کشورهای پیشرفته می باشد.

در این نوع فرآیندها به دلیل تغییر شکل‌های شدید که باعث اعمال کرنشهای خیلی زیاد بدون تغییر در ابعاد نمونه می شود مواد نانو ساختار تولید می شوند. در فرآیند ذکر شده با روی هم قراردادن و جفت کردن ورقها یا تسمه ها (انباشته سازی) و ایجاد اتصال توسط فرآیند نورد به عبارت دیگر جوش سرد نوردی که در سیکلهای مختلف تکرار می شود در نهایت موادی با ساختار نانو بوجود می آید، در این فرآیند ابتدا دو لایه از یک جنس بعد از آماده سازی سطحی (سطوح مقابل هم) شامل چربی زدایی و پرس کاری و در صورت نیاز برای افزایش استحکام پیوند بین فصل مشترک آنها ضمن نورد پیش گرم شده و بوسیله فرآیند نورد به یکدیگر متصل می شوند سپس در مرحله بعد تسمه دو لایه حاصل به دو قسمت مساوی تقسیم شده و نوارهای بریده شده مجدداً بعد از آماده سازی سطحی و پیش گرم به طور همزمان نورد می شود. و این فرآیند به صورت متوالی تکرار می شود تا ذرات به اندازه نانو ۱۰ تا ۱۰۰ نانو متر

برسد. لازم به ذکر است که دمای پیش گرم باید در زیر دمای تبلور مجدد ماده انجام گیرد زیرا باعث حذف کرنشهای تجمعی می شود.

برای شبیه سازی این مواد نانو ساختار دو روش تک مقیاس و چمد مقیاس استفاده می شود. روشهای تک مقیاس مثل دینامیک مولکولی، کوانتومی و ..... و روشهای چند مقیاس مثل روشهای المان یا روشهای بدون مش و غیره. در روشهای تک مقیاس می توان کلیه جزئیات اتمها را مورد بررسی قرارداد ولی این روشها با محدودیت همراه است به خصوص برای سیستمهای در مقیاس بزرگ بسیار مشکل و پرهزینه و بعضا غیرممکن می باشد. به همین دلیل روشهای محیط پیوسته (المان محدود) به نحوی بر این مشکل قانع آمده است. که در این روشها با توجه به مفهوم انتگرالگیری عددی در روش اجزای محدود که تنها با استفاده از چند نقطه معروف به نام نقاط گوسی انجام می شود محاسبات روش اتمی که نیاز به داشتن موقعیت تمامی اتمها را دارد با استفاده از اتمهای خاص که از کل دامنه انتخاب می شوند تقریب می زند.

روش مورد استفاده در این پروژه از روشهای المان محدودی به نام روش شبه پیوسته یا می باشد که روشی استاتیکی و بر مبنای قانون کوش برون استوار است که در سال ۱۹۹۶ توسط او وهمکارانش ارائه گردید. در این روش ابتدا یک جسم تغییر شکل داده را می توان مانند جسم پیوسته ای در نظر گرفت که یک میدان تغییر شکل برای آن تعریف کرده باشیم و سپس برخلاف سایر روشهای محیط پیوسته که از خواص تجربی بهره می گیرند در این روش از روشهای اتمی

برای محاسبه انرژی کل جسم استفاده می شود و سپس با استفاده از مینیمم سازی انرژی کل و با استفاده از یک منطقه انتقالی به محیط پیوسته (مناطق که قوانین المان محدود قابل استفاده است) و استفاده از روشهای میان یابی در المان محدود انتگرال گیری عددی با استفاده از تنها چند نقطه معروف به نقاط گوسی محاسبات به طور قابل مقایسه ای کاهش می یابد. و به این ترتیب مشکلات روشهای تک مقیاسه منتفی می گردد.

## 5-2 نام دانشجو: محققان

استاد راهنما: دکتر محمود سلیمی

عنوان رساله: ارائه مدل تغییر شکل پلاستیک مواد در مقیاس نانو

مطالعه برای ارائه یک مدل تئوریک که قادر به تشخیص و تحلیل مرز نابجائی ها و مناطق معیوب هنگام تغییر شکل و چرخش شبکه کریستال برای تغییر شکل های موضعی و باندهای برش آغاز شده است.

این مدل تحلیلی مسائل پلاستیسیته در مقیاس نانو را امکان پذیر می سازد. مدل مذکور بر اساس اصول فیزیکی حرکت نابجائی ها و ارتباط آنها با عیوب مختلف را بیان می کند.

## 6-2 نام دانشجو: اشرافی

استاد راهنما: دکتر محمود سلیمی

**عنوان رساله:** تولید توده مواد نان ساختار به کمک روش تغییر شکل شدید مواد

در سالهای اخیر مواد توده ای نانو ساختار [NSM : bulk nano structured material] که بوسیله روشهای مختلف تغییر شکل شدید پلاستیک [SPD: Severe Plastic Deformation] تولید می شوند علاقه روزافزون متخصصین را به خود جلب کرده است. مواد " تغییر شکل پلاستیک یافته شدید" اغلب دارای اندازه ای حدود 100-200 نانو متر بوده و دانه های داخلی آن دارای چند زیر ساختار که بخاطر شبکه کریستالی شدیداً اعوجاج یافته می باشند. علاوه بر آن تحلیل X-ray ابعاد کریستالی در حدود 50 nm را نشان می دهد. به این دلیل مواد SPD به عنوان مواد توده ای نانو ساختار نامیده می شوند. این علاقه نه تنها به دلیل خواص فیزیکی و مکانیکی بهتر بلکه مزایای متعدد این مواد نسبت به مواد نانو ساختار تولید شده از روشهای دیگر است. بویژه روش SPD باعث رفع بعضی ضعف های باقیمانده در مقایسه با نمونه های فشرده شده بدلیل ناخالصی ایجاد شده در آسیاب ها میشود و بنابراین اصولاً " فرآیند تولید مواد توده ای نانو ساختار بوسیله SPD جایگزین روشهای دیگر مانند متالورژی پودر این مواد میگردد. کاملاً واضح است که تغییر شکل های زیاد به وسیله تغییر شکل های سنگین مثل نورد سرد یا کشش باعث کوچک شدن میکروساختارها در دمای پایین می شود. به هر حال ساختارهای شکل گیری شده معمولاً " زیر ساختارهای سلولی شکل کم تغییر جهت یافته هستند. در حالیکه نانو ساختارهای شکل گیری شده از SPD ساختارهایی با دانه بندی ریز داشته و عمدتاً " دارای زاویه دانه بزرگ می باشند. شکل گیری چنین ساختارهایی در SPD تحت تغییر شکل بسیار زیاد، دمای کم و فشار زیاد صورت می گیرد. چند روش تغییر شکل مکانیکی برای SPD شناخته شده است که دو روش معروف عبارتند از از کرنش پیچشی شدید تحت فشار زیاد (Severe Torsion Straining) و فشردن از کانال مساوی زاویه دار (equal channel angular pressing) که این روشها قادر به تولید مواد نانو ساختار تعدادی از آلیاژهای تجاری می باشند. مواد نانو ساختار تولید شده بوسیله SPD عموماً از جنبه های زیر قابل ملاحظه اند.

۱- افزایش فوق العاده استحکام مکانیکی و تغییر مدل الاستیسیته نسبت به ماده اولیه

۲- مقاومت در مقابل سایش و خوردگی نسبت به ماده اولیه

۳- تغییر خواص الکترومغناطیسی این مواد نسبت به ماده اولیه

برای تولید این مواد تنها به ماشین های شکل دهی و قالب احتیاج بوده و برای انجام تحقیقات در این زمینه میکروسکوپ الکترونی که قادر به تصویربرداری در حد 200 nm باشد احتیاج خواهد بود.

در این طرح تحقیقاتی موارد زیر دنبال می گردد.

۱- تحلیل ایجاد نانو ساختارها از روش SPD به روش اجزاء محدود و کران بالایی

۲- تولید نمونه های آزمایشگاهی به منظور بررسی کیفیت محصولات و کارایی این روش

## 7-2 نام دانشجو: امامی فر،

اساتید راهنما: دکتر محمدشاهدی - دکتر مهدی کدیور

**عنوان رساله:** استفاده از نانو ذرات نقره در سیستم‌های مواد غذایی زیست تجزیه پذیر

نانو تکنولوژی، توانمندی تولید، ابزار و سیستم‌های جدید با در دست گرفتن کنترل در سطح مولکولی و اتمی و استفاده از خواص آنها در مقیاس نانو است. کلمه نانو از یک واژه یونانی به معنای کوچک و ریز مشتق شده است و عبارت است از فهم و کنترل مواد در ابعاد بین (۱۰۰-۱) نانومتر. که این پدیده کاربردهای جدیدی را به همراه دارد. این علم به محققان اجازه می‌دهد تا ارتباط میان خواص ماکروسکوپی و میکروسکوپی را در مواد بیولوژیک گیاهی و جانوری تشخیص دهند. یکی از مهمترین بخش‌های صنعت غذای تمام کشورها که با امنیت غذایی در ارتباط است استفاده از تکنولوژیهای نو در صنایع غذایی است. استفاده از فناوری های نوین در این بخش رویکرد جدیدی است که می‌تواند مورد توجه باشد. یکی از موارد کاربرد فناوری نانو در صنعت غذا استفاده آن در بسته‌بندی‌های غذایی است. چشم‌انداز فناوری نانو، صنایع بسته بندی را پررونق نشان می‌دهد. سهم بازار در این صنعت در حال حاضر ۱/۱ میلیارد دلار است و پیش‌بینی می‌گردد تا سال ۲۰۱۰ به ۷/۳ میلیارد دلار برسد. امروزه عدم وجود بسته بندی مناسب در محصولات کشاورزی یکی از عوامل اصلی ضایعات ۳۰ الی ۵۰ درصدی در این بخش تولید شده است. مهاجرت گازها و میکروارگانیسم‌ها به داخل بسته و خروج گازها از بسته‌های خاصی که تحت اتمسفر مخصوص بسته‌بندی شده‌اند به بیرون از جمله عوامل موثر در طول عمر محصولات غذا می‌باشد. بکارگیری علم نانو در صنعت بسته‌بندی غذایی و تولید بسته‌هایی با قابلیت نفوذپذیری کمتر به گازها و یا بسته‌بندی‌های ضد میکروبی امری لازم و ضروری است. قوانین محیط زیست امروزه گرایش زیادی به استفاده از بسته‌بندی‌های زیست تجزیه پذیر دارند در این میان استفاده از منابع تجزیه پذیر طبیعی به عنوان ماده اصلی بسته مطلوب است. در این میان نشاسته و سلولز مثال خوبی است. اغلب مسمومیت‌ها و فساد مواد غذایی بدلیل حضور میکروارگانیسم‌های عفونت‌زا و مولد فساد در غذاهاست که بیشتر در مرحله پس از برداشت و یا پس از تولید (آلودگی ثانویه) اتفاق می‌افتد و اغلب عمر نگهداری محصول را کاهش می‌دهد بکارگیری بسته‌بندی‌های ضد میکروب پاسخ مناسبی به حل این مشکل است. یکی از مشکلات بسته‌های تولید شده با ترکیبات طبیعی تجزیه پذیر تحت تاثیر قرار گرفتن آنها توسط میکروارگانیسم‌ها و اکسیژن و ماندگاری کم آنها در طول نگهداری بسته غذا است. مشاهده شده است که نانو ذرات نقره قدرت بالایی در جلوگیری از رشد میکروارگانیسم‌ها در بسته‌های غذایی دارد و می‌تواند عمر برخی از غذاها را ۲ الی ۳ برابر افزایش دهد و از سوی دیگر احتمال بروز مسمومیت را نیز در غذاها کاهش می‌دهد. لذا در این تحقیق سعی بر آن است تا از نانو ذرات نقره به عنوان یک ماده ضد میکروب طبیعی در بسته‌بندی‌های زیست تجزیه پذیر از جنس نشاسته استفاده و اثرات آن بر عمر نگهداری غذا و سلامت بسته در طول نگهداری از نظر اثر اکسیژن و میکروارگانیسم‌ها مورد بررسی قرار گیرد.

ضمیمه ۳ - پایان نامه های کارشناسی ارشد

### 1-3 نام دانشجو: هادی احمري

#### عنوان پایان نامه: بررسی رفتار الکترو رئولوژیکی نانو سیالات

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

نانو تکنولوژی زمینه ای نو در علم و تکنولوژی با پتانسیل عظیم اجتماعی و اقتصادی است که انسان را به سمت فهم و کنترل نو بر روی ساختار و خواص همه مواد طبیعی یا ساخت دست انسان هدایت می کند. نانو سیالات به سوسپانسیون اطلاق می شود که شامل نانو ذرات توزیع شده در یک سیال واسط است. این سیالات رفتارهای مختلفی از خود نشان می دهند که می توان از آن جمله به افزایش یا کاهش ویسکوزیته، جذب سطحی و انتقال حرارت اشاره کرد.

نانو سیالات (Electro Rheological) ER سوسپانسیونهایی هستند شامل نانو ذرات و سیالاتی با رسانایی ضعیف که در اثر تحریک میدان الکتریکی خارجی تغییر شدیدی در خواص رئولوژیکی آن صورت می گیرد. پتانسیل زیاد سیالات ER در کاربرد های صنعتی توجهات زیادی را به خود جلب کرده و فعالیتهای زیادی در صنعت و جوامع علمی به این قلمرو معطوف گشته است، که از آن جمله می توان به موارد کاربرد آن در کلاچ و ترمز ماشین، تسریع پاسخ سیال، ایجاد سیالات هوشمند و ... اشاره کرد. در پایان نامه حاضر، با اعمال جریان مستقیم بر روی برخی از نانو سیالات، خواص رئولوژیکی آنها مورد بررسی و تحلیل قرار می گیرد. اثر پارامتر های مختلف شدت میدان، نوع سیال، نوع ذره، دما و ... بر روی خواص رئولوژیکی از عواملی است که در این پایان نامه مد نظر قرار خواهند گرفت.

### 2-3 نام دانشجو : سعیده سلطانی

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

#### عنوان پایان نامه : بررسی جوشش نانو سیالات نیوتنی و غیر نیوتنی

در میان موضوعات بسیار از سیستمهای مهندسی افزایش انتقال حرارت جوشش به عنوان پدیده ای از انتقال حرارت که تغییر فاز در آن رخ می دهد مورد توجه می باشد. از جمله روشهای نوین مورد توجه، استفاده از نانو سیال به عنوان تکنیکی جدید در سالهای اخیر می باشد. هدف از انجام این تحقیق بررسی تأثیر استفاده از نانو سیال غیر نیوتنی روی پدیده جوشش و حصول منحنی جوشش برای این گونه سیالات می باشد. این مبحث تا کنون در زمینه سیالات غیر نیوتنی مورد مطالعه قرار نگرفته است.

در این پروژه بررسی اثر افزودن نانو ذرات مختلف ( $CuO, Cu, Al_2O_3$ ) به سیالات غیر نیوتنی مدل پاورلا مثل (محلول CMC) روی پدیده جوشش، محاسبه شار حرارتی و بررسی نوع جوشش در حالت های مختلف مورد نظر می باشد. در این تحقیق از سیالات پایه با اندیس پاورلاهای مختلف و همچنین از نانو ذرات مختلف و درصد وزنی متفاوت آنها استفاده و اثر این پارامترها روی پدیده جوشش بررسی خواهد گردید.

### 3-3 نام دانشجو: سهراب خان محمدی

**استاد راهنما:** دکتر سید غلامرضا اعتماد

**عنوان پایان نام:** بررسی اثر افزایش نانو ذرات روی خواص حرارتی روغنهای موتور

فناوری نانو روز به روز در حال گسترش و پیشرفت است. این تکنولوژی نه تنها از لحاظ علمی حائز اهمیت است، که تبدیل به دغدغه حکومت ها شده و بسیاری از کشور ها در حال سرمایه گذاری در این میدان هستند. فناوری نانو همچنین منحصر به رشته و گرایش علمی خاصی نبوده و در اغلب شاخه های علم دارای کاربرد بوده و سرآغاز پیشرفت های جدید شده و جایگاه خویش را یافته است.

یکی از این شاخه ها نانو سیالات (nano fluids) هستند. پیش از دست یابی به فناوری تولید ذرات نانو، در پی آن بودند تا ذراتی با ضریب هدایت حرارتی بالا به سیالاتی که کاربرد گرمادهی یا گرماگیری دارند (واسطه های حرارتی) اضافه کنند و به این ترتیب هدایت حرارتی این واسطه ها را افزایش دهند و با افزایش این خاصیت مسلماً ضریب جابجایی حرارتی (convective heat transfer coefficient) نیز بالا می رود که از لحاظ کاربرد صنعتی قابل توجه است. چرا که این یعنی انتقال حرارت بیشتر، و نتیجه مستقیم آن نیاز کمتر به سطوح انتقال حرارت و سیال واسطه حرارتی است. مثال بارز و آشکار آن مبدل های حرارتی هستند که در مقیاس بالایی در فرایندهای صنایع شیمیایی استفاده می شوند. سیال واسطه بهتر مترادف است با مبدلهای کمتر (هزینه سرمایه گذاری پایین تر) و سیال کمتر (هزینه پمپاژ پایین تر و هزینه کارکرد کمتر). رادیاتور اتومبیل نمونه دیگری است. ولی ذراتی در مقیاس میلی و میکرو نتوانستند پاسخگو باشند. به دلیل خوردندگی بالا و ته نشینی و . سرانجام با تولید نانو ذرات (nano particles) این امکان محقق شد .

آزمایشات نشان داده اند که افزایش نانو ذرات (nanoparticles) به سیال هدایت حرارتی آن را به میزان چشمگیری افزایش می دهد. این افزایش در حدی است که با هیچ یک از مکانیسم های شناخته شده انتقال حرارت همخوانی ندارد و بیشتر از آن چیزی است که شبیه سازی ها با مکانیسم های موجود نشان می دهند. هم اکنون تلاش بسیاری برای عملی کردن امکان استفاده از نانو سیال در صنعت و همچنین یافتن مکانیسم های دخیل در آن در جوامع علمی در جریان است و طبعاً استفاده عملی از نانو سیال در مقیاس صنعتی در گرو کار تئوریک و یافتن این مکانیسم ها است. چرا که برای طراحی نیاز به این مکانیسم ها داریم. در پروژه حاضر قصد داریم تاثیر افزودن نانو ذرات را بر روی ضریب هدایت حرارتی و ظرفیت حرارتی روغن موتور بررسی کنیم.

روغن موتور ها علاوه بر اینکه نقش روانکاری و جلوگیری از برخورد مستقیم سطوح فلزی را دارند ، حرارت را از اجزاء داخلی می گیرند و موتور را در شرائط پایدار دمایی قرار می دهند. بنا بر آنچه گفتیم افزایش خواص حرارتی روغنهای موتور از طریق افزودن نانو ذرات و بررسی تئوریک علل و عوامل مترتب بر آن می تواند به عنوان یک هدف مطرح باشد .

### 3-4 نام دانشجو: شهلا صفری

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

**عنوان پایان نامه:** بررسی رفتار انتقال حرارت نانو سیالات نیوتنی و غیر نیوتنی در مبدل‌های حرارتی دو لوله ای  
مفهوم نانوسیال در واقع مربوط به نوع جدیدی از سیالات در زمینه انتقال حرارت می باشد. این سیالات محلول‌های سوسپانسیونی حاوی ذراتی فلزی و یا اکسیدهای فلزی با قطر کمتر از ۱۰۰ نانومتر هستند. از کاربردهای نانوسیالات در صنعت میتوان استفاده از آنها در مبدل‌های حرارتی به عنوان سیال خنک کننده را نام برد. در آزمایشهایی که بر روی نانوسیالات انجام خواهیم داد، سعی خواهد گردید با تهیه سیال نیوتنی و غیر نیوتنی شاخصهای حرارتی همچون ضریب انتقال حرارت جابجایی در مبدل حرارتی دو لوله ای با جریان همسو و ناهمسو بررسی گردد. با اندازه گیری دقیق دما اثر افزودن نانوذرات مختلف مثل  $\text{Cu}$ ،  $\text{Al}_2\text{O}_3$  و  $\text{CuO}$  با غلظتهای مختلف و اندازه های متفاوت بر شاخصهای حرارتی مطالعه و بررسی می گردد.

### 3-5 نام دانشجو: مجید رضا محجوب

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

**عنوان پایان نامه:** حرکت و انتقال حرارت سیالات غیر نیوتنی در میکروکانال های مستطیلی  
در تحقیق حاضر، میدان جریان و انتقال حرارت سیالات غیر نیوتنی در میکروکانال‌های مستطیلی شکل، بصورت عددی مورد مطالعه قرار گرفته است. جریان بصورت لغزشی، سه بعدی، پایدار، تراکم ناپذیر و آرام در نظر گرفته شده و از مدل تابع نمایی برای تحلیل رفتار سیال غیر نیوتنی استفاده شده است. شرایط مرزی حرارتی، شار حرارتی ثابت در دیواره و دمای دیواره ثابت در نظر گرفته می شود. اتلاف حرارتی در نظر گرفته شده و تمامی خواص فیزیکی باستانی ویسکوزیته ثابت می باشند. توزیع سرعت و دما در ورودی میکروکانال یکنواخت می باشد. معادلات حاکم، شامل معادله پیوستگی، ممنتوم و انرژی با استفاده از متغیرهای خاص بدون بعد شده اند. مجموعه معادلات دیفرانسیل حاکم در کنار هم با توجه به شرایط مرزی با استفاده از روش عددی اختلاف محدود بر مبنای حجم کنترل حل شده اند. توزیع سرعت محوری، سرعت مرکزی، حاصلضرب عدد رینولدز و ضریب اصطکاک فیننگ، دمای حجمی بدون بعد، عدد ناسلت موضعی، دمای دیواره بدون بعد برای شرط مرزی حرارتی شار حرارتی ثابت و همچنین شار حرارتی بدون بعد دیواره برای شرط مرزی دمای دیواره ثابت برای محدوده وسیعی از شاخص مدل تابع نمایی، عدد رینولدز، عدد پراتل و ضریب لغزش و نسبت اضلاع بدست آمده اند. نتایج نشان می دهد که حاصلضرب عدد رینولدز و ضریب اصطکاک فیننگ و سرعت مرکزی با افزایش شاخص مدل تابع نمایی افزایش می یابد و با در نظر گرفتن لغزش در دیواره کاهش این مقادیر مشاهده می گردد. اختلاف نسبی حاصلضرب عدد رینولدز و ضریب اصطکاک فیننگ بین حالت لغزشی و غیر لغزشی با افزایش شاخص مدل تابع نمایی افزایش داشته و در نتیجه اثر لغزش در سیالات دایالانت قویتر از سیالات شبه پلاستیک می باشد. افزایش عدد رینولدز، عدد پراتل، نسبت اضلاع و ضریب لغزش در دو شرایط مرزی حرارتی موجب افزایش عدد ناسلت گشته در حالی که افزایش شاخص مدل تابع نمایی ضریب انتقال حرارت را کاهش می دهد. در دو شرط مرزی حرارتی، اختلاف نسبی عدد

ناسلت بین حالت لغزشی و غیرلغزشی برای شاخصهای بالاتر مدل تابع نمایی افزایش می‌یابد و در نتیجه اثر لغزش در سیالات دایلاتنت بیشتر از سیالات شبه‌پلاستیک می‌باشد. اختلاف نسبی عدد ناسلت بین حالت لغزشی و غیرلغزشی در شرط مرزی حرارتی شار حرارتی ثابت در دیواره بیشتر از شرط مرزی دمای دیواره ثابت می‌باشد و بیانگر این است که اثر لغزش در شرایط مرزی حرارتی شار حرارتی ثابت در دیواره بیشتر از شرایط مرزی دمای دیواره ثابت است. در نظر گرفتن اتلاف لزجی در دو شرایط مرزی حرارتی موجب کاهش عدد ناسلت می‌گردد و اثر اتلاف لزجی در سیالات دایلاتنت بیشتر از سیالات شبه‌پلاستیک می‌باشد. و در نظر گرفتن تغییرات ویسکوزیته با دما سبب افزایش عدد ناسلت می‌گردد.

### 6-3 نام دانشجو: روح الله یدوی

استاد راهنما: دکتر سید غلامرضا اعتماد

#### عنوان پایان نام : بررسی روشهای حذف فلزات سنگین از پسابها به کمک فناوری نانو

موضوع اهمیت و تاثیر آب در حیات اقتصادی، اجتماعی و فرهنگی ملتها بر همه کس واضح است. با این حال کم توجهی به این مطلب مهم، منابع آب کره زمین را در معرض نابودی و تخریب قرار داده است. گردش آب در صنعت موجب می‌شود تا با ورود ناخالصی‌ها کیفیت آب کاهش پیدا کرده و به پساب تبدیل گردد. در کشور ما با توجه به رشد صنایع و نیز استاندارد نبودن و قدیمی بودن اکثر صنایع، میزان مصرف آب و در نتیجه تولید پساب به مراتب بیشتر از کشورهای پیشرفته است.

فلزات سنگین بطور وسیعی در فرایندهای صنعتی مورد استفاده قرار می‌گیرند به طوری که می‌توان گفت پسابهای تولیدی مربوط به صنایع متفاوتی نظیر معدن، متالورژی، کاغذسازی، چرمسازی، آبکاری، ریخته‌گری، پلاستیک، عکاسی، الکترونیک، تولید کود و مواد شیمیایی و به خصوص صنایع آهن و فولاد حاوی غلظتهای خیلی بالا از فلزات سنگینی نظیر سرب، نیکل، کادمیم، کروم، مس، آهن، روی، منگنز و جیوه هستند. این عناصر به علت خواص سمی و تجمع پذیری و پایداری، حتی در غلظتهای کم از اهمیت زیست محیطی بالایی برخوردار هستند. حتی هنگامی که این فلزات مستقیماً در صنعت مورد استفاده قرار نگیرند ممکن است که در بسیاری از موارد به صورت یک ناخالصی همراه با مواد اولیه مورد استفاده در صنعت وجود داشته باشند. از آنجایی که تنها بخش ناچیزی از این فلزات در فرایندهای تصفیه فیزیکی شیمیایی جدا می‌شوند (واحدهای تصفیه فیزیکی شیمیایی از نظر ساخت، نگهداری و تهیه مواد شیمیایی مورد نیاز، گران و پرهزینه می‌باشند) و اصولاً واحدی به منظور جداسازی فلزات سنگین وجود ندارد، پسابهای خروجی از تصفیه خانه‌های صنعتی مقایسه‌پذیر از این آلاینده‌ها را با خود حمل می‌کنند و از این طریق آلودگیهای ثانوی خاک و آبهای سطحی و آبهای زیرزمینی را سبب می‌گردند. در عین حال باید توجه داشت که وجود این فلزات سبب ایجاد عوارضی نظیر مسمومیت، سرطان‌زایی و اثرات ژنتیکی کوتاه و بلند مدت خواهد شد. مشکل حذف فلزات سنگین از پسابها از جمله مسائلی است که امید است به کمک فناوری نانو قابل حل باشد. کارهایی نظیر نانوفیلتراسیون و یا استفاده از نانو جاذبهای پلیمری جهت جذب این آلاینده‌ها از جمله موارد مربوط به نانوتکنولوژی در حیطه مسائل زیست محیطی است.

هدف از انجام این پروژه، انجام جداسازی فلزات سنگین با استفاده از فناوری نانو از طریق استفاده از نانو ذرات خاص و بررسی پارامترهای تاثیر گذار در جداسازی خواهد بود. در این روش از نانو ذرات مغناطیسی استفاده خواهد گردید. اساس کار استفاده از خاصیت مغناطیسی این ذرات و تعلیق این ذرات در داخل محیطهای آبی آلوده شده به فلزات سنگین است. در این صورت مکانیسم جداسازی، جذب سطحی بر روی این نانو ذرات خواهد بود. اثر پارامترهای مختلفی نظیر دما، PH، زمان تماس، غلظت اولیه فلزات سنگین و غلظت اولیه نانو ذرات در جداسازی بررسی می شود. در انتها به کمک ایجاد یک میدان مغناطیسی و استفاده از خاصیت مغناطیسی این ذرات، می توان ذرات به کار گرفته شده را بر روی یک شبکه ماتریسی ( که خود دارای خاصیت مغناطیسی است) در داخل محلول جدا کرد.

### 7-3 نام دانشجو: عباس صفایی

استاد راهنما: دکتر ابراهیم شیرانی

**عنوان پایان نامه:** شبیه سازی جریان و انتقال حرارت در هندسه های با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن

هدف از انجام پایان نامه حاضر توسعه یک برنامه کامپیوتری برای شبیه سازی جریان و انتقال حرارت با ابعاد میکرو به کمک روش شبکه بولتزمن، به کارگیری و تست شرایط مرزی پخش مولکولی برای بررسی سرعت لغزشی و پرش دمایی روی دیوار با استفاده از روش شبکه بولتزمن است.

برای رسیدن به اهداف فوق یک برنامه کامپیوتری توسعه داده شده است که با استفاده از روش شبکه بولتزمن قابلیت شبیه سازی جریان و انتقال حرارت با هندسه های مختلف و ابعاد مختلف را دارد. این برنامه جریان و انتقال حرارت گاز را در رژیم های پیوسته، لغزشی و رژیم گذار را براحتی می تواند شبیه سازی کند. این برنامه کامپیوتری از روش شبکه بولتزمن بکمک شرط مرزی پخش مولکولی روی دیوار و شرط مرزی ساکی برای دمای ورودی و خروجی استفاده می کند. همچنین برای محاسبه زمان آرامش از روش وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن استفاده شده است.

برنامه کامپیوتری اولیه جریان بین دو صفحه با رانش اختلاف فشار را شبیه سازی می کرد. در کار حاضر علاوه بر تغییرات هیدرودینامیکی بر روی برنامه و بررسی شرایط مرزی پخش مولکولی و شرایط مرزی سرعت ورودی، شبیه سازی انتقال حرارت بکمک روش شبکه بولتزمن به آن افزوده شد. ابتدا روش شبکه بولتزمن برای چند مورد با ابعاد ماکرو شامل جریان و انتقال حرارت در حفره با اعداد رینولدز متفاوت و جریان کوئت بررسی و نتایج با نتایج حاصل از حل معادلات ناویر-استوکز و معادله فوریه برای انتقال حرارت مقایسه گردید و صحت برنامه کامپیوتری و دقت جوابها بررسی شد. این بررسی نشان داد که نتایج روش حاضر با دقت بسیار خوبی به دست آمده اند. سپس روش شبکه بولتزمن برای هندسه های با ابعاد میکرو شامل جریان و انتقال حرارت در میکروکانال ها، میکروحفره ها و جریان میکرو کوئت با اعداد نودسن مختلف با استفاده از اعمال شرط مرزی پخش مولکولی و وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن شبیه سازی شد. نتایج حاصل از حل جریان و انتقال حرارت در ابعاد میکرو با روشهای مونت کارلو، دینامیک مولکولی و ماکسول مقایسه شد که نشان داد که روش حاضر از دقت بسیار بالایی برای

بررسی جریان و انتقال حرارت در ابعاد میکرو برخوردار است. همچنین میزان انتقال حرارت (عدد ناسلت) در طول ورودی کانالهای با ابعاد میکرو و ماکرو با هم مقایسه شد نتایج مقایسه، تغییرات قابل توجه میزان انتقال حرارت در طول ورودی را نشان می‌دهد.

### 8-3 نام دانشجو: سعید جعفری فرسنگی

استاد راهنما: دکتر ابراهیم شیرانی

**عنوان پایان نامه:** شبیه سازی جریان در هندسه های با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن هدف از این پایان نامه توسعه یک برنامه کامپیوتری برای جریانهای با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن، به کارگیری و تست شرایط مرزی پخش مولکولی و روش ترکیبی کمانه کردن و آینه ای برای اندرکنش سیال و سطح جامد و مطالعه لغزش روی سطح، بررسی پدیده می نیم نودسن و امکان مشاهده آن با استفاده از روش شبکه بولتزمن و بالاخره شبیه سازی جریان در محیط های متخلخل با ابعاد میکرو با استفاده از روش شبکه بولتزمن است. برای رسیدن به اهداف فوق یک برنامه کامپیوتری توسعه داده شده است که با استفاده از روش شبکه بولتزمن قابلیت شبیه سازی جریان با هندسه های مختلف و ابعاد مختلف را دارد. این برنامه می تواند جریان گاز را در رژیم های پیوسته، لغزشی و تا حدودی رژیم گذار شبیه سازی می کند. در این برنامه کامپیوتری از چهار روش پخش مولکولی، کمانه کردن، آینه ای و ترکیبی از این دو برای اعمال شرایط مرزی روی دیوار استفاده شده است. همچنین از دو روش برای محاسبه زمان آرامش شامل وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن و مرتبط کردن آن با چگالی محلی و عدد نودسن استفاده شده است.

برنامه کامپیوتری اولیه جریان بین دو صفحه با رانش اختلاف فشار را شبیه سازی می کرد. ابتدا روش شبکه بولتزمن برای چند مورد با ابعاد ماکرو شامل جریان در حفره با اعداد رینولدز متفاوت و جریان کوئت بررسی و نتایج با نتایج حاصل از حل معادلات ناویر استوکس مقایسه گردید و صحت برنامه کامپیوتری و دقت جوابها بررسی شد. این بررسی نشان داد که نتایج روش حاضر با دقت بسیار خوبی به دست آمده اند. سپس روش شبکه بولتزمن برای هندسه های با ابعاد میکرو شامل جریان در میکرو کانال ها، میکرو حفره ها و جریان میکرو کوئت با اعداد نودسن مختلف با استفاده از اعمال شرط مرزی پخش مولکولی و وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن شبیه سازی شد و با استفاده از این روش پدیده می نیم نودسن نیز برای اولین بار با استفاده از روش شبکه بولتزمن مشاهده شد. بالاخره روش شبکه بولتزمن معرفی شد که در آن زمان آرامش به عدد نودسن و چگالی محلی وابسته شد و ترکیبی از شرایط مرزی کمانه کردن و آینه ای روی مرزهای جامد اعمال شد. با روش فوق جریان در یک میکرو کانال شبیه سازی شد و با توجه به توانایی روش برای شبیه سازی جریان با اشل های طولی مختلف از این روش برای شبیه سازی جریان در یک کانال متخلخل با ابعاد میکرو و ضرایب تخلخل متفاوت استفاده گردید. دقت نتایج حاصل از طریق محاسبه افت فشار داخل میکرو کانال متخلخل بررسی گردید

### 9-3 نام دانشجو: محمد ابراهیم پور

استاد راهنما: دکتر محمود سلیمی ، دکتر سعید ضیائی راد

عنوان پایان نامه: شبیه سازی فرآیند و بررسی خواص مکانیکی مواد نانو ساختار تولید شده به روش اتصال

نوردی تجمعی (ARB) به کمک روش شبه پیوسته (Quasicontinuum)

توسعه صنعتی هر کشور مدیون تلاشهایی است که در راستای پیشرفت علم همگام با کشورهای توسعه یافته صورت می گیرد. در این راستا در سالهای اخیر گسترش علم فناوری نانو را شاهد هستیم ، به طوری که بسیاری از کارشناسان فناوری نانو را انقلاب صنعتی قرن ۲۱ می دانند، بی شک بکارگیری این فناوری می تواند نقش بسزایی در رشد و توسعه کشور داشته باشد.

مواد با ساختار نانو به خاطر خواص منحصر به فردی که از خود نشان می دهند از قبیل استحکام بالا، انعطاف پذیری و مناسب ، مقاومت به خستگی ، مقاومت به سایش ، سختی بالا ، نفوذ پذیری زیاد، خواص نوری و مغناطیسی عالی و خواص سوپر پلاستیسیته ، نسبت به مواد با دانه بندی درشت و متوسط و کاربرد در صنایع مختلف از قبیل الکترونیک ، خودروسازی ، هوافضا و صنایع نظامی و .... از اهمیت بسزایی برخوردار است.

## ضمیمه 4- مقالات کنفرانسهای علمی (داخلی و خارجی)

1-4 اولین کنفرانس فناوری نانودر محیط زیست - اسفندماه ۱۳۸۵ - دانشگاه صنعتی اصفهان

### انتقال گرما در میکرو کانالها به کمک روش شبکه بولتزمن

عباس صفایی ، ابراهیم شیرانی

با کوچک شدن ابعاد مسئله و در نتیجه افزایش عدد نودسن، نمی توان از فرض پیوسته بودن جریان و روابط حاکم بر جریان که با استفاده از این فرض به دست آمده اند استفاده کرد. همچنین معادله انتقال گرمای فوریه صادق نخواهد بود. لذا در این مقاله برای بررسی انتقال گرمای جریان سیال در یک میکروکانال از روش عددی شبکه بولتزمن استفاده می کنیم. علاوه بر حل جریان سیال، از یک مدل گرمایی روش شبکه بولتزمن برای پیش بینی توزیع دما در جریان میکروکانالها بهره جسته ایم. مدل مورد استفاده، یک مدل نه سرعتی یا تابع توزیع نه جهتی برای بدست آوردن توزیع های جرم، مومنتم و دما در جریان میکروکانال می باشد. در این مدل از یک زمان استراحت که همواره تابعی از عدد نودسن می باشد استفاده کرده ایم. بر این مبنا اثر تغییر عدد نودسن را بر روی رفتار جریان و انتقال گرما و بخصوص پرش دما در نزدیکی سطح را بررسی کرده ایم. در جریان میکروکانالها با افزایش عدد نودسن پرش دما و سرعت لغزشی روی دیوار نیز افزایش می یابد.

**واژه های کلیدی:** مدل گرمایی شبکه بولتزمن، میکرو کانال، تقریب BGK، شرایط پرش دما در مرز

2-4 اولین کنفرانس فناوری نانودر محیط زیست - اسفندماه ۱۳۸۵ - دانشگاه صنعتی اصفهان

### شبیه سازی میکرو جریان ها با استفاده از روش شبکه بولتزمن

سعید جعفری ، ابراهیم شیرانی

در کار حاضر با استفاده از روش شبکه بولتزمن جریان گاز در هندسه های با ابعاد میکرو شبیه سازی شده است. برای انجام این شبیه سازی با استفاده از تئوری جنبشی زمان آرامش به عدد نودسن وابسته شد. شرط مرزی پخش مولکولی برای در نظر گرفتن لغزش روی دیوارها اعمال شد. جریان میکرو کوئت، جریان در یک میکرو حفره و جریان در یک میکرو کانال شبیه سازی شد. در کلیه موارد شبیه سازی شده نتایج حاصل با نتایج تحلیلی و عددی دیگران مقایسه شد که توافق بسیار خوبی مشاهده شد. در کار حاضر برای نخستین بار رفتار جریان در یک میکرو حفره مورد بررسی قرار گرفت. همچنین پدیده نودسن می نیمم برای اولین بار با استفاده از روش شبکه بولتزمن مشاهده شد.

**واژه های کلیدی:** روش شبکه بولتزمن - زمان آرامش - شرط مرزی پخش مولکولی - میکروکانال

### شبیه سازی جریان در هندسه های با ابعاد به روش شبکه بولتزمن

سعید جعفری ، ابراهیم شیرانی

در این مقاله جریان سیال در هندسه های با ابعاد میکرو بوسیله روش شبکه بولتزمن شبیه سازی شده است. این مقاله با دو هدف نوشته شده است. یکی وابسته کردن زمان آرامش به عدد نودسن و دیگری بررسی محدوده عدد نودسن که در آن جریان جواب مناسبی می دهد. از شرط مرزی پخش مولکولی روی دیوارها استفاده شده است. جهت ارزیابی صحت نتایج جریان کوئت و جریان در یک میکرو حفره کانال مدل شده است. برای جریان کوئت در محدوده وسیعی از عدد نودسن مسئله حل شد و بر روی صحت نتایج بحث شده است. نتایج حاصل با روش مونت کارلو و روش شبکه بولتزمن انتروپیک مقایسه شد که توافق خوبی را نشان می دهد.

**واژه های کلیدی:** روش شبکه بولتزمن - زمان آرامش - شرط مرزی پخش مولکولی - میکرو کانال.

---

### بررسی مدل های تخمین ضریب هدایت حرارتی نانو سیالات

محمد نصیری ، غلامرضا اعتماد

در استفاده از نانو سیال جهت انتقال حرارت نیاز به دانستن هدایت حرارتی آن می باشد. مدل های کلاسیکی نظیر مدل ماکسول در غلظتهای زیاد نانو ذره در سیال پایه برآورد قابل قبولی از هدایت حرارتی نانو سیال بدست نمی دهند. با لحاظ کردن پارامترهای نظیر حرکت براونی نانو ذرات مدل های دیگری برای این مسئله ارائه گردیده است. در این مقاله پس از معرفی مدل های مختلف کارائی مدل های کلاسیک و مدل های جدید ارائه شده بررسی گردیده است.

---

### تهیه ریزلایه های کیتوسانی جهت تصفیه آلاینده های زیست محیطی

هما همایونی، سیدعبدالکریم حسینی و معصومه ولی زاده

ساختارهای نانو به واسطه داشتن ویژگیهای منحصر به فرد، از کاربردهای مختلفی برخوردارند. یکی از مهم ترین زمینه های کاربردی منسوجات تهیه شده از الیاف نانو، فیلتراسیون می باشد. تخلخل و نسبت سطح به حجم بالا و اندازه نانومتریکی حفره ها و خواص ویژه جذب فیزیکی و شیمیایی از جمله دلایل راندمان بالای این نوع فیلترهاست. در کنار خواص فوق الذکر، استفاده از پلیمرهای فعال و با قدرت جذبی بالا امکان افزایش قدرت جذب فیلترها و ارتقاء کارائی آن ها را فراهم می سازد. یکی از مهمترین این پلیمرها که از جایگاه بالائی در فیلتراسیون برخوردار است بیوپلیمر طبیعی کیتوسان است. بدیهی است تلفیق این دو ویژگی یعنی کاربرد بیوپلیمر کیتوسان (CS) در تولید نانو فیلترها می تواند کارائی محصول را در حد قابل توجهی افزایش دهد. البته الکترورسی کیتوسان به واسطه ویسکوزیته بالای محلول آن فرآیندی دشوار است. در این تحقیق ابتدا وزن مولکولی (CS) کاهش داده شد و سپس محلول ۵wt CS در اسید استیک ۹۰٪ (AcOH) جهت الکترورسی بکار گرفته شد. نتیجه این فرایند تولید نانو الیاف بدون دانه CS با میانگین قطری ۱۴۱ nm می باشد.

**واژه های کلیدی:** کیتوسان (CS) - اسید استیک (AcOH) - نانو فیلتر - الکترو رسی.

### تهیه پارچه چندلایه محافظ از ریز لایه PAN و بررسی خواص مکانیکی آن

سیدعبدالکریم حسینی راوندی، معصومه ولی زاده و راضیه هاشمی صنعتگر

ساختارهای نانو به واسطه ویژگیهای خاص فیزیکی و شیمیایی شان در دهه اخیر جایگاه ویژه ای یافته و از کاربردهای روزافزونی برخوردار گشته اند. سطح مخصوص و تخلخل بالا، قابلیت جذب فیزیکی ذرات و مواد معلق، و ویژگیهای خاص تراوایی و نفوذ پذیری هوا از جمله دلایل کارآیی بالای این ساختارها در موارد مختلفی از قبیل کاربردهای پزشکی و فیلتراسیون است. براین اساس در این مقاله روشی جهت تولید پارچه چند لایه دارای نانو فیلتر جهت کاربرد در البسه محافظ ارائه شده و خواص مکانیکی آن از قبیل ویژگیهای کششی، برشی، فشاری و خمشی آن مورد بررسی قرار می گیرد. پارامترهای محاسبه شده در هر دسته برای ارزیابی راحتی پوشش مورد استفاده قرار می گیرند.

**واژه های کلیدی:** البه محافظ - نانو فیلتر - خواص مکانیکی - راحتی پوشش

## بررسی امکان تولید الیاف نانو از بیوپلیمر طبیعی سدیم آلجینات به روش الکتروریسی

سمیه صفی ، محمدمرشد، سیدعبدالکریم حسینی ، مهران غیائی

بیوپلیمر طبیعی آلجینات به دلیل زیست سازگاری عالی با بدن ، زیست تخریبی ، غیر سمی بودن و اثر التیام بخشی زخمها ، کاندیدای مناسبی برای کاربردهای زیست پزشکی است و به خاطر دارا بودن خواص بیولوژیکی مطلوب در زمینه های متعددی نظیر وسایل بهداشتی و آرایشی ، مواد پزشکی ، پوشش زخم بندی و افزودنیهای غذایی و ... استفاده شده است. با توجه به مزایا و خواص مطلوب بیوپلیمر طبیعی آلجینات و مزایای مضاعفی که لیف نانو تولید شده از آن خواهد داشت ، در این مقاله ، دردو بخش به بررسی امکان الکتروریسی این بیوپلیمر پرداخته شد. در بخش اول ، الکتروریسی بیوپلیمر خالص آلجینات و تاثیر افزودن برخی افزودنیهای مناسب نظیر سطح فعال و حلالهای آلی بر افزایش قابلیت الکتروریسی این محلول پلیمری بررسی شد که نتایج رضایت بخشی حاصل نگردید. در بخش دوم ، با افزودن غلظتهای مختلف پلیمر های مصنوعی غیر سمی و زیست سازگار پلی اتیلن اکساید و پلی ویتیل الکل (به طور جداگانه) به محلول آبی سدیم آلجینات ، الکتروریسی مخلوطهای پلیمری به طور موفقیت آمیز انجام شد. نحوه برهم کنش پلیمرها در مخلوط پلیمری با کمک طیف سنجی مادون قرمز (FTIR) ارزیابی شد. نتایج حاصله ، نشان دهنده برهم کنش ضعیف بین پلیمری (نظیر پیوند هیدروژنی) مابین گروههای هیدروکسیل سدیم آلجینات و اکسیژن اتر در زنجیر پلیمری PEO (و گروههای هیدروکسیل PVA) بود. همچنین ، ساختار و توزیع قطری الیاف الکتروریسی شده ، به کمک تصاویر میکروسکوپ نوری و میکروسکوپ الکترونی رویی (SEM) مورد بررسی قرار گرفت. مطالعات رئولوژیکی انجام شده روی محلولهای پلیمری نیز حاکی از آن بود که قابلیت الکتروریسی و مورفولوژی نانو الیاف ، به شدت به ویسکوزیته محلول و در نتیجه به نسبت سدیم آلجینات به پلیمر مصنوعی وابسته است.

**واژه های کلیدی:** سدیم آلجینات ، الکتروریسی ، الیاف نانو، پلی اتیلن اکساید، پلی ویتیل الکل ، مخلوط

پلیمری

## ضمیمه 5- مقالات چاپ شده در مجلات علمی پژوهشی

5-1 مجله علوم و تکنولوژی پلیمر، مجله پلیمر فارسی جلد شماره 4- صفحه (241 تا 248) - 2005

### الکترورسی نانو الیاف پلی آکریلونیتریل تک محوری موازی و آرایش یافته به وسیله جمع کننده های فاصله دار

روح اله جلیلی، سید عبدالکریم حسینی و محمد مرشد

الکترورسی، رسیدن مستقیم نانو الیاف از محلولهای پلیمری با تکیه بر نیروهای الکتروستاتیکی است. در این پژوهش، ابتدا دستگاه الکترورسی طراحی و ساخته شد. سپس با اعمال تغییراتی در روش استفاده از صفحات فلزی فاصله دار نانو الیاف تک محوری موازی شده پلی آکریلونیتریل در محلولهای 10، 12/5 و 15 درصد وزنی دردی متیل فرمامید، در شرایط بهینه تولید و رسیدن شدند. در این روش برخلاف شیوه متداول جمع آوری نانو الیاف که به وسیله جمع کننده ای ایستا انجام می گیرد، اجازه استراحت کامل به زنجیرهای مولکولی داده نشد، در نتیجه آرایش مولکولی اولیه نانو الیاف که در حین الکترورسی بدست آمده بود، حفظ شد. ساختار دسته این الیاف به وسیله میکروسکوپیهای نوری و الکترون پویشی بررسی و وجود آرایش یافتگی و ضریب شکست مضاعف به کمک میکروسکوپ نور قطبیده تأیید شده است.

5-2 مجله علوم و تکنولوژی پلیمر- سال نوزدهم - شماره 2 - صفحه 130-131، 1315

### بررسی عوامل موثر بر مقدار تولید نانو الیاف پلی آکریلونیتریل الکترورسی شده

روح اله جلیلی، سید عبدالکریم حسینی و محمد مرشد

الکترورسی، رسیدن مستقیم نانو الیاف از محلولها و مذاب پلیمری بر اساس نیروهای الکتروستاتیک است. این پژوهش، تلاش برای یافتن عوامل افزاینده مقدار تولید نانو الیاف بدون تغییر در قطر آنهاست. به منظور بررسی مقدار تولید، عوامل موثر بر ولتاژ بحرانی در فرآیند الکترورسی با توجه به معادله تیلور، مورد توجه قرار گرفت. برای الکترورسی نانو الیاف، از محلول 15 درصد وزنی پلی آکریلونیتریل در دی متیل فرمامید استفاده شد. افزایش ولتاژ از 10 به 20 KV باعث افزایش تولید نانو الیاف به مقدار 600 درصد شد. میانگین قطری نانو الیاف به تدریج از 385 به 315 mm کاهش یافت. اما، توزیع قطری نانو الیاف با افزایش ولتاژ عریض تر شد. در طول ثابت سوزن سرنگ معادل 3/5 cm، ولتاژ بحرانی از 9/5 به 6/5 KV کاهش و مقدار تولید نانو الیاف 42 درصد

افزایش یافت. نتایج نشان می دهد با تغییر در طول و قطر سوزن سرنگ ، تغییر معنی داری در میانگین و توزیع قطری نانو الیاف مشاهده نشد. برای بررسی معنی دار بودن مقایسه نتایج ، از روش تحلیل با استفاده از نرم افزار SPSS در سطح اطمینان  $\alpha = 0/50$  استفاده شد. برای تعیین قطر نانو الیاف الکتروریسی شده میکروسکوپ الکترون پویشی بکار گرفته شد.

**واژه های کلیدی:** الکتروریسی، نانو الیاف ، قطر سوزن سرنگ ، طول سوزن سرنگ، مقدار تولید